

# ANALIZA MATERIJALA PO KARAKTERISTIČNIM X-ZRAKAMA

## Fizikalna podloga spektroskopije X-zraka

Svojim modelom atoma 1913., prije svega postulatom stacionarnog stanja i postulatom frekvencija, N. Bohr je kvantno utemeljio atom i uspio objasniti linijske spektre, ispravno opisujući sam izvor zračenja – atom. Shodno tome modelu, koji se poslije pokazao samo kao prijelaz od klasične prema kvantnoj teoriji, ali i pored toga vrlo prkladan za fenomenološke opise mnogih pojava, energija karakterističnih X-zraka bi bila:

$$h\nu_{mn} = E_m - E_n = (\alpha_e Z)^2 \cdot \frac{m_0 c^2}{2} \cdot \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$$

$E_m$  – više početno (*initial*) stanje

$E_n$  – niže konačno (*final*) stanje

$m > n$

gdje su  $n$  i  $m$  prirodni brojevi,  $n$  odgovara nižem krajnjem stanju, a  $m$  višem početnom stacionarnom stanju ( $E_n < E_m$ ).  $\alpha_e$  je elektromagnetska konstanta fine strukture,  $\alpha_e = \frac{e^2}{2\varepsilon_0 h c} = 1/137$ ,  $\frac{\alpha_e m_0 c^2}{2} = 13,6 \text{ eV}$  je Rydbergova energija (konstanta).

Za  $K_\alpha$  karakterističnu seriju je  $n=1$  i  $m=2$ , a za  $L_\alpha$  seriju je  $n=2$  i  $m=3$ . Međutim, ovakva slika nije vjerodostojna, jer stvarni naboj jezgre je manji od iznosa  $Ze$  zbog utjecaja ostalih  $K, L, \dots$  elektrona u ioniziranom atomu. Taj je utjecaj u početnome (višem) stanju veći nego u krajnjem (nižem) kada se X-prijelaz događa, i taj utjecaj prema tome, općenito treba i moguće je uzeti u obzir za svako stanje u atomu, posebice ako eksperimentalni rezultati to zahtijevaju. Ako se radi npr., o  $K_\alpha$  seriji, onda  $L$  elektroni “vide” naboj jezgre zaklonjen s  $K$ -elektronom, a i utjecaj ostalih elektrona iz viših ljusaka koji je praktički zanemariv, treba uzeti u obzir (zajedničkom konstantom zaklanjanja ili zasjenjenja).

X-spektroskopiju, koja bi uzela u obzir navedeni efekt, utemeljio je Moseley raspolažući već s Braggovom teorijom refleksije X-zraka i ondašnjim eksperimentalnim iskustvima. Moseley je otkrio linearnu vezu između atomskih brojeva laganih elemenata i  $\sqrt{\nu}$  za karakteristične  $K_\alpha$  i  $L_\alpha$  X-linije.

Npr., za  $K_\alpha$  seriju (prijelaz iz  $2p_{1/2}$  u  $1s_{1/2}$ ) to bi bilo:

$$h\nu = 13,6 (Z - 1)^2 \cdot \left( \frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2} \right) [\text{Ev}]$$

Moseley je pisao  $\nu = R(Z-b)^2$ ,  $b=1$  i  $k=3/4$ ; konstantu  $R$  je dodao Sommerfeld.

$(Z-1)$  je efektivni naboj jezgre „zasjenjen“, elektronom koji se nalazi u  $1s$  stanju, i vrijedi općenito za cijelu  $K$ -seriju. Za elektrone unutrašnjih ljusaka, pri prijelazu, vrijedi slika vodikovog atoma uz naboj jezgre zaklonjen (screening) drugim elektronima, tako da se Moselejeva formula za karakteristične X-zrake općenito može napisati kao:

$$h\nu = 13,6 (Z - b)^2 \cdot \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) [\text{Ev}]$$

gdje je  $b$  konstanta koja izriče veličinu zasjenjivanja jezgrinog naboja. Moseley-ev rad je za fiziku i periodni sustava od velikog povi jesnog i značenja.

Tako je započela, i dalje se razvijala X-spektroskopija, najprije identifikacijom novih elemenata po karakterističnim X-zrakama, dok danas intenzivnim razvojem poluvodičkih detektora je moguća kvalitativna i kvantativna analiza (do točnosti od  $10^{-15}$  grama) raznih uzoraka po karakterističnim X-linijama sastojaka u uzorcima. Još je Moseley opazio da su linije bakra izražajnije od linije cinka u karakterističnome X-spektru uzorka bronce, i tako u cijelosti započeo analizu materijala po karakterističnim X-zrakama.

Pretpostavka metode jest bilo koji proces koji u elektronskoj ljusci formira šupljinu. Formiranje šupljine izaziva preuređivanje elektronske ljuske, i za manje od  $10^{-15}$  sekundi nastala šupljina se popunjava drugim elektronom. Od interesa su, prije svega, šupljine u K ili L ljusci. Popunjavaju je pridružena ili pojava emisije karakterističnog X-fotona (energija odgovara razlici energija staza ili emisija Augerovog elektrona, ili i jedno i drugo. Prema tome u kojoj ljusci je šupljina (u koju ljusku će se prijelaz dogoditi) razlikujemo, već spomenute K-seriju ili L-seriju.

Prava analiza nastupa tek onda kada eksperimentalno dobivenu liniju „prepoznamo“ u K ili L spektru elementa. Prijelaz u K ljusku, daje za razne materijale tzv. K-seriju linijskih spektara, dok prijelaz u L daje L-seriju. Prijelaz iz L u K imenuje se  $K_\alpha$  linijom, a prijelaz iz M u K daje  $K_\beta$  liniju. Prijelaz iz O u K daje  $K_\gamma$  liniju, iz O u K  $K_\delta$  liniju, itd. Analogno je i za  $L_\alpha$ ,  $L_\beta$ ,  $L_\gamma$  linije, itd. Za dani element, valna duljina karakterističnog X-zračenja opada od M-serije prema L-seriji i dalje prema K-seriji, što je razumljivo s obzirom da elektron mora dosegnuti to niža stanja (šupljine) da bi sukcesivnim prijelazima „zatvorio“ jezgru.

$$\text{linije nastale prijelazima u K – stazu} \left\{ \begin{array}{l} K_\alpha \leftarrow \text{iz L} \\ K_\beta \leftarrow \text{iz M} \\ K_\gamma \leftarrow \text{iz N} \\ K_\delta \leftarrow \text{iz O} \end{array} \right.$$

## Osjetljivost metode analize materijala po karakterističnim X-zrakama

Određivanje količine elementa po karakterističnim X-zrakama uvjetovano je svojstvima detektora i elektroničkog sustava, njegovoj mogućnosti za dobar spektralni odziv. U tom smislu, osjetljivost je definirana najmanjom količinom materijala potrebnoj da u karakterističnom vrhu X-spektra daje broj događaja (impulsa) koji je veći od pozadine u spektru. U X-spektroskopiji, ako je N broj događaja (impulsa) u vrhu, a  $N_B$  razina pozadine, vrh je raspoznatljiv za:

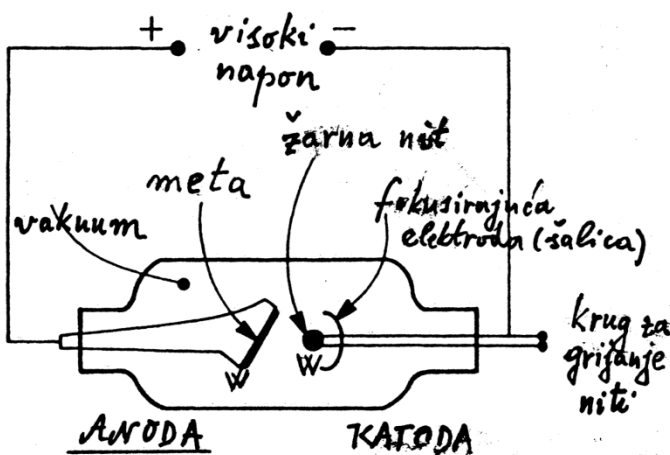
$$N \geq \sqrt{3N_B}$$

U X-spektroskopiji induciranjem X-zračenja X ili Y-zrakama, primarni izvor pozadine je Comptonovo raspršenje. Pobuđivanjem X-linija protonima, tzv. PIXE metoda,  $\alpha$ , ili teškim ionima, zakodno zračenje sekundarnih elektrona je osnovni izvor šuma, dok induciranje ubrzanim elektronima stvara zakodno zračenje zaustavljanjem primarnih elektrona u meti.

## KONTINUIRANE I KARAKTERISTIČNE X-ZRAKE (SPEKTRI)

W.C. Röntgen je 1895. proizveo prodorno X-zračenje tako da se snop elektrona sudara s metom. To je i danas osnovica laboratorijskih i akceleratoriskih tehnika dobivanja X-zračenja u fizici i fizici materijala, do medicinskih i industrijskih promjena. Valjda naglasiti fizikalnu bit stvaranja X-zračenja, polazeći od slike inverznog (obratnog) fotoelektričnog efekta: pojedinačni elektron može proizvesti X-foton pridajući mu energiju sve do njegove vlastite kinetičke energije ( $E_{\text{kin}} \geq h\nu_X$ ). Dakle, monoenergijski snop elektrona stvara kontinuirani spektar X-zraka s energijama X-fotona do vrijednosti energije snopa. Kontinuirane X-zrake se, s obzirom na proces stvaranja, uobičajeno nazivaju „bremsstrahlung“ (zakočno zračenje).

Moderna izvedba cijevi za X-zračenje prikazana je na slici 1.

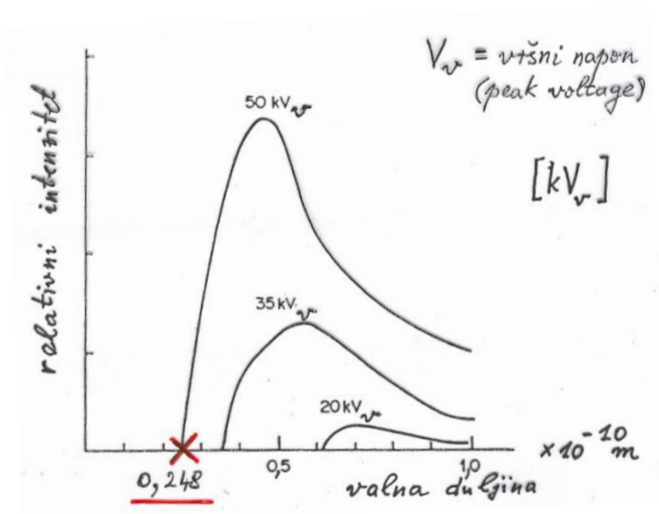


Slika 1 : Shema moderne cijevi za X-zračenje s nepokretnom metom – anodom

Katoda i anoda su neprodušno zatvorene pod visokim vakuumom u cijevi. Katoda je napravljena u obliku žarne niti od volframove (W) niti ugrađene tako da je u središtu fokusirajuće elektrode u obliku šalice. Tijekom operiranja, grijana žarna nit izbacuje ili kipi elektronima koji se ubrzavaju prema anodi u jakom električnom polju između anode i katode (visoki napon). Fokusirajuća šalice usmjerava elektrone na žarišnu ravninu anode, koja je tipično napravljena iz volframa. Elektroni se naglo zaustavljaju u meti (anodi), emitirajući kontinuirane (neprekinute) X-zrake u svim smjerovima. Odatle i potječe naziv „zakočno zračenje“. Tek oko 1% energije elektrona se pretvara u korisne X-zrake koje izlaze kroz prozor cijevi, a preostalih 99% se gubi u sudarima elektrona s atomskim elektronima u meti (pobuđivanju i ionizaciji atoma) dajući toplinu koju treba odvesti iz mete. Anoda se hladi protočnim (cirkulirajućim) uljem ili vodom. Koriste se i rotirajuće anode u X-cijevima da bi se radna temperatura cijevi održavala niskom.

## KONTINUIRANI X-SPEKTRI

Tipični neprekinuti X-spektri što ih daje X-cijev koja operira na različitim naponima, ali s istom strujom, prikazani su na slici 2. Vidimo da se intenzitet cijevi relativno (značajno) povećava s naponom cijevi jer se efikasnost zakočnog zračenja povećava povećanjem energije elektrona.



**Slika 2 :** Kontinuirani X-spektri pri različitim vršnim radnim naponima (pri istoj struji).

Najmanja valna duljina  $\lambda_{\min}$  X-fotona s najvećom energijom (vidi sliku 2), računa se prema formuli:

$$h\nu = \frac{hc}{\lambda_{\min}} = E_{\text{kin}} = E \implies \lambda_{\min} = \frac{hc}{E}$$

gdje je  $E_{\text{kin}}$  kinetička energija elektrona, a gdje smo uzeli idealni slučaj da je energija X-fotona jednaka energiji elektrona ( $E_{\text{kin}}=E=h\nu$ ). Koristeći uobičajenu jedinicu ångström, Å [ $10^{-10}\text{m}$ ] za valnu duljinu zračenja i jedinicu eV za energiju, dobivamo praktičnu formulu:

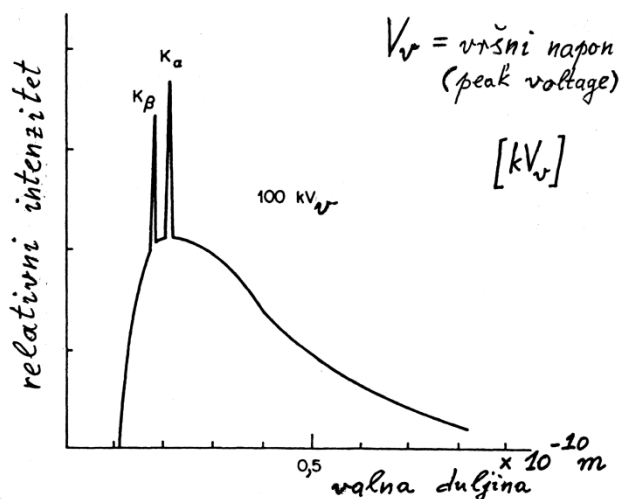
$$\lambda_{\min} = \frac{hc}{E}$$

$$\lambda_{\text{\AA}} \times 10^{-10} = \frac{3 \cdot 10^8 \times 6,626 \cdot 10^{-34}}{1,602 \cdot 10^{-19} \times E_{\text{eV}}} \implies \lambda_{\text{\AA}} = \frac{12400}{E_{\text{eV}}}$$

Za najgornju krivulju na slici 2, dobivamo  $\lambda_{\min} = 12400/50000 = 0,248 \text{ \AA} = 0,248 \times 10^{-10} \text{ m} = 0,025 \text{ nm}$  na mjestu gdje krivulja X-spektra presijeca apscisu. Samo radi usporedbe, optička valna duljina ljubičastog zračenja iznosi ( $\geq 4000 \text{ \AA}$  ili  $\geq 400 \text{ nm}$ ): uspoređivanjem valnih duljina zračenja, uočite koliko elektronski mikroskop ima ogromno veću moć razlučivanja od optičkog. Najveće energije X-zraka (koje odgovaraju najmanjim valnim duljinama) navode se prema njihovim najvećim vršnim naponima u kilovatima (kV<sub>r</sub>), kao što je naznačeno na slici.

## KARAKTERISTIČNI X-SPEKTRI

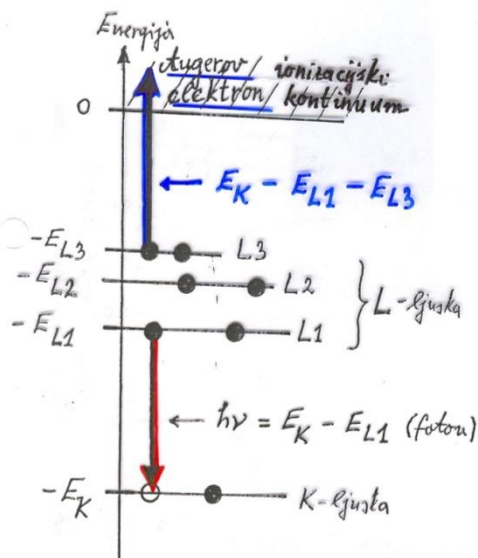
Povećanjem radnog (visokog) napona u cijevi, elektroni udarajući u metu mogu izbaci elektrone iz atoma mete: nastaju diskretne X-zrake. Za volfram, energija vezanja K-ljuske jest  $E_K=69,525$  keV. Diskretne zrake se emitiraju kada elektroni viših ljusaka popunjavaju šupljine u nižim unutrašnjim ljuskama: energije nastalih fotona su karakteristika elementa iz kojeg je meta napravljena. Karakteristične X-zrake se superponiraju (izranjaju) na kontinuiranim spektrima, kao na slici 3. One se označavaju kao  $K_\alpha$ ,  $K_\beta$  i tako dalje.



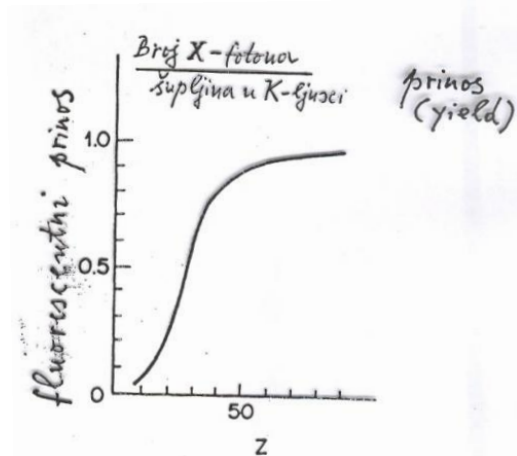
**Slika 3** : Karakteristične X-zrake za volfram: vide se  $K_\alpha$  i  $K_\beta$  diskretne X-zrake.

kad se šupljina u K-ljusci popunjava elektronima iz L-ljuske, M-ljuske i tako dalje. K-zrake i L-zrake volframa imaju finu strukturu koje nisu naznačene na slici, dolje je naglašen samo fizikalni uvjet da napon cijevi mora biti veći od energije vezanja u K-ljusci. Moseleyeva otkrića i vezu između korijena karakteristične frekvencije  $\sqrt{\nu}$  i  $Z$  (redni broj višeelektronskog atoma) smo već opisali u tekstu.

Opisati ćemo još fenomenološki Augerove elektrone, na primjeru emisije elektrona iz L-ljuske (ostavljajući u njoj šupljinu) kao alternativni i neoptički prijelaz uobičajenome prijelazu u šupljinu u K-ljusci kojim se emitira foton. Shematski ćemo opisati Augerovu emisiju pomoću L-ljuske (s tri podljuske s obzirom na kutni moment količine gibanja elektrona  $\vec{L}$  i projekcije  $L_z$  na os  $Z$ ).



**Slika 4** : Emisija Augerovog elektrona (shematski)



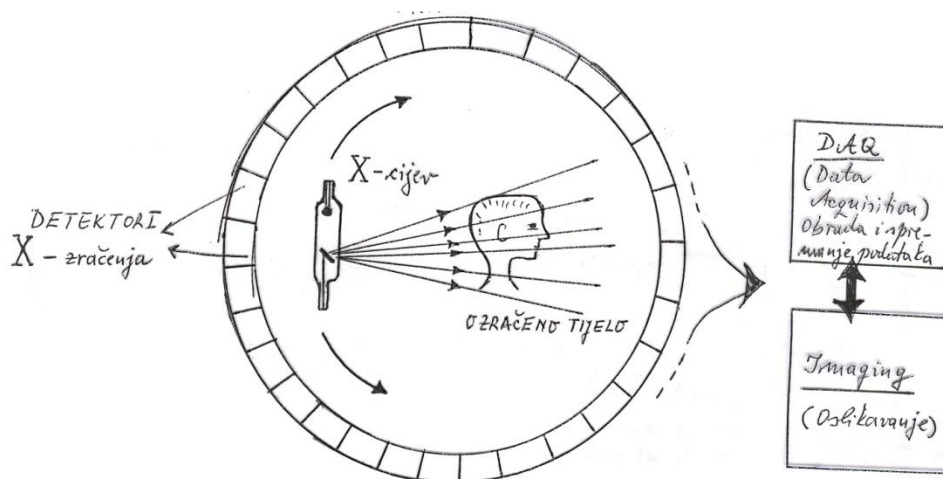
**Slika 5** : Fluorescentni K-prinos X-fotona u ovisnosti o elementu  $Z$ .

Na slici 4. se vidi prijelaz elektrona iz  $L1$  u  $K$ -ljusci tako da nastaje foton energije  $E_K - E_{L1}$ . Međutim, ova se energija alternativno može predati elektronu u  $L3$  podljusci koji onda napušta atom kao Augerov elektron čija kinetička energija iznosi:  $E_K - E_{L1} - E_{L3}$ .

Slika 5. prikazuje interesantnu ovisnost fluorescentnog prinosa (yield) pojedinog elementa. Prinos je definiran kao broj  $K$ -fotona  $X$ -zračenja nastalih po šupljini u  $K$ -ljusci. Taj fluorescentni  $K$ -prinos se mijenja od sićušnog iznosa za elemente niskog  $Z$  do gotovo jedinice za visoke  $Z$ . Dakle, emisija Augerovih elektrona prevladava nad  $K$ -fotonskom emisijom kod elemenata niskih  $Z$ .

## RAČUNALNA TOMOGRAFIJA CT (COMPUTED TOMOGRAPHY) I TEHNIKA PET (POSITRON EMISSION TOMOGRAPHY)

Primjene X-zračenja: fizika konolenzirane tvari, astronomija, fizika čestica, industrija i medicina.

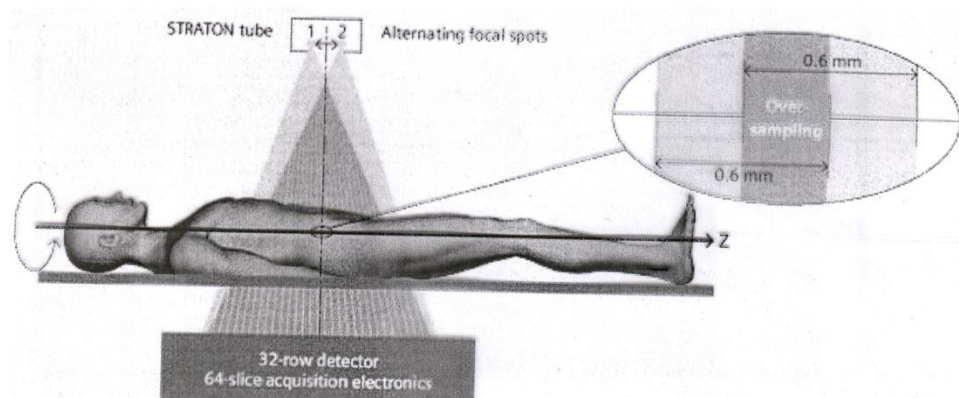


Slika 6 : Fizikalna osnova za PET tehniku i CT.

Tehnika PET (Position Emission Tomography): isotobna detekcija dva kolinearna  $\gamma$ -fotona ( $\gamma$ -zrake) od 511 keV, koji nastaju iz pozitron-elektron anihilacije.

Moderna tehnologija primjene x-zračenja u dijagnostici (organi, mozak,... čitavo tijelo). Brzina dobivanja računalnih slika ovom metodom iznosi oko 100 slika („slices“) tijekom jednog trajanja ozračivanja ( $\leq 1$  sekunde ).

## MODERNA IZVEDBA I PRIMJENA CT-a



**Slika 7 :** Princip i primjena suvremenog Ct-a

Brzina vrtnje (za jedan puni krug) detektora: oko 0,4 sekunole (vrijeme ozračivanja)

Tipični broj pozicijski osjetljivih detektora: 32 do 64.

Broj slika ( „slices“ ): do 64.



# FENOMENOLOŠKA SVOJSTVA POLUVODIČA

## Pobuđivanje nosilaca i Fermijeva energija u čistom poluvodiču

Broj nosilaca (elektrona)  $N_e$ , koji će se toplinskim pobuđenjem naći u vodljivom pojasu, ako je poluvodič na temperaturi  $T$ :  $N_e = \int_{E_g}^{\infty} S(E) \cdot f(E) \cdot dE$

Broj pobuđenih nosilaca = gustoća stanja x vjerojatnost zaposjednosti stanja

Vrh valentnog pojasa ( vrpce )= nivo nulte energije

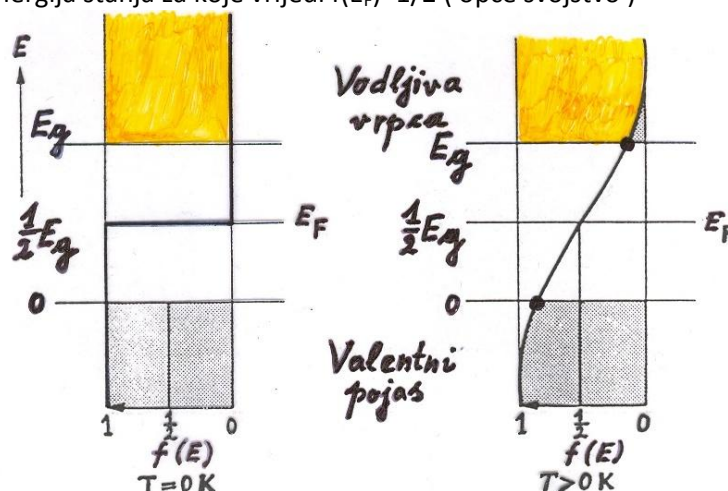
$E_g$  = širina zabranjenog pojasa ili dno vodljive vrpce

$f(E)$  = funkcija Fermi-Diracove razdiobe

Funkcija  $f(E)$  ima Fermijevu energiju  $E_F$  kao normirajući parametar:

$E_F$  = energija najvišeg zaposjednutog stanja na 0K u metalima

$E_F$  = energija stanja za koje vrijedi  $f(E_F)=1/2$  ( opće svojstvo )



Svojstva intrinzičnog poluvodiča na  $T=0K$ :

Čisti poluvodič na  $T>0K$ :

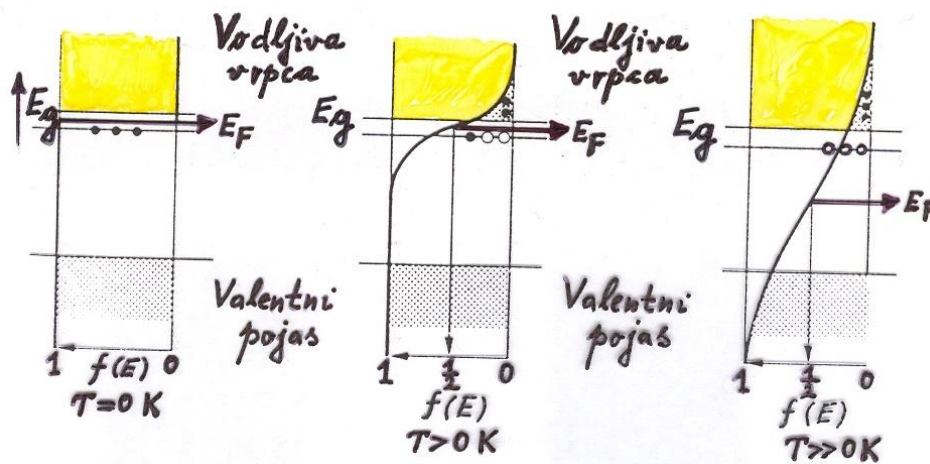
- Valentni pojas je popunjen, a vodljivi prazan.  
 $f(E)$  je koračna ( „step“ ) funkcija, koja mora promijeniti iznos od 0 na 1 unutar zabranjenog pojasa.
  - Iz razloga simetrije slijedi da je:  
 $E_F = 1/2 E_g$
  - Pobuđenih elektrona ( u vodljivoj vrpci ) ima upravo toliko koliko i šupljina ( u valentnom pojasu ).
  - U dobroj aproksimaciji, ostaje da je:  
 $E_F \approx 1/2 E_g$
- Ova je relacija točna ako je gustoća stanja  $S(E)$  na vrhu valentnog pojasa jednaka gustoći stanja na dnu vodljive vrpce.



## Položaj Fermijeve energije u dopiranim poluvodičima

Položaj  $E_F$  u  $n$ -tipu ili  $p$ -tipu poluvodiča potpuno je različit od onog u intrinzičnom.

Promatramo, kvalitativno, položaj  $E_F$  u  $n$ -tipu u ovisnosti o temperaturi:



**Uzorak  $n$ -tipa je na  $T=0K$ :**

Sva stanja u valentnom pojasu i ona donorskog nivoa su popunjena.

Fermijev nivo  $E_F$  smješten između donorskog nivoa i dna vodljive vrpce.

**Uzorak je na  $T>0K$ :**

Donorski atomi se ioniziraju.

Fermijev nivo  $E_F$  se neznatno spušta.

**Uzorak je na  $T>>0K$ :**

Intrinzično pobuđivanje (pobuđivanje elektrona preko  $E_g$  pojasa) postaje veliko.

Šupljine se pobuđuju gotovo u Fermijev Istoj mjeri u kojoj i elektroni.

Vjerojatnost zaposjednutosti od 50% biti će na polovici  $E_g$ :

$$E_F \approx 1/2 E_g$$

Položaj Fermijevog nivoa  $E_F$  u  $n$ -tipu poluvodiča je približno na donorskom nivou.

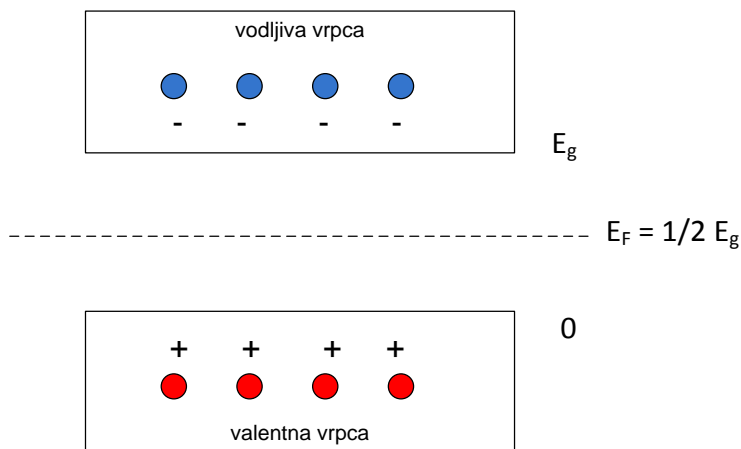
Analogno slijedi definicija:

Fermijev nivo  $E_F$  u  $p$ -tipu poluvodiča je smješten u samoj blizini nivoa akceptora.

Razlike u položajima Fermijevog nivoa su temeljac razumijevanja rada svih poluvodičkih (mikroelektroničkih) uređaja koji koriste  $p$ - $n$  spoj.

## POLUVODIČI ( primjer Ge ). TEORIJA VRPCI I IONIZACIJA

Podrazumjeva se poznavanje osnove strukture vrpce izolatora, poluvodiča i vodiča iz drugih kolegija (elektronike i mikroelektronike). Pogledajmo vrpce (energijski dijagram stanja) u intrinzičnom (čistom) poluvodiču:

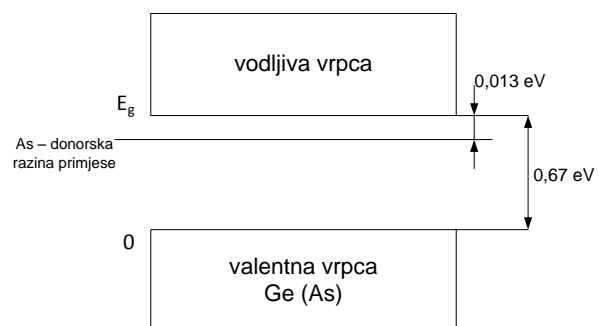


**Slika 8 :** Zaposjednutost energijskih stanja u čistome poluvodiču na sobnoj temperaturi. Fermijeva energija  $E_F$  položena je točno sredinom zabranjenog pojasa.

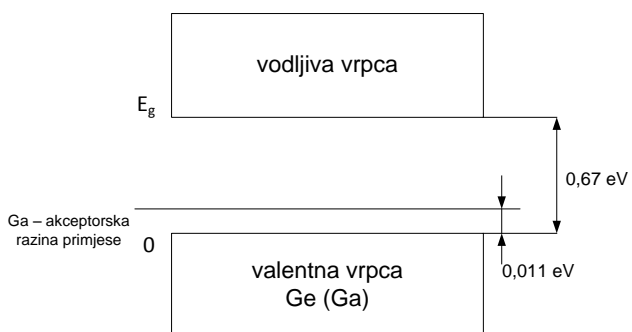
Inherentna vodljivost na sobnoj temperaturi ograničava se na mali broj elektron-šupljina parova. Ona bitno ovisi o veličini zabranjenog pojasa s obzirom na toplinsko pobuđivanje  $kT$ . Iz slike 8 vidimo da je mali broj elektrona pobuđen (ioniziran) u vodljivu vrpca, ostavljajući jednak broj šupljina u valentnoj vrpca. Vodljivost poluvodiča se značajno povećava tehnikama dopiranja atoma iz susjednih grupa periodnog sustava u kristalnu rešetku poluvodiča.

Pogledajmo primjer  $^{72}_{32}\text{Ge}$  -poluvodiča (četverovalentni poluvodič, polumjer atoma  $1,37\text{\AA} = 1,37 \times 10^{-10}\text{m}$ ), dopiranog primjesom arsena (**As**, peterovalentna donorska primjesa, polumjer atoma  $1,39\text{\AA} = 1,39 \times 10^{-10}\text{m}$ ) ili galija (**Ga**, trovalentna akceptorska primjesa). Peterovalentna primjesa (poput **As**) ima pet valentnih elektrona i daje jedan elektron više povrh osam kovalentnih veza (elektrona) između susjednih **Ge**-atoma. Trovalentna primjesa (poput **Ga**) ima jedan elektron manje da bi se umjestila u rešetku **Ge** i formirala regularni kovalentni kristal. Galij veže (podiže) elektrone, ostavljajući pozitivno nabijene šupljine u valentnoj vrpca **Ge**.

Energijski dijagrami **Ge**-poluvodiča dopirani **As** ili **Ga** primjesama, vide se na slici 9.



**Slika 9a :** Ge-kristal s **As**-donorskim atomima (*n*-tip poluvodiča jer su nosioci struje negativni).



**Slika 9b :** Ge-kristal s **Ga**-akceptorskim atomima (*p*-tip poluvodiča jer su nosioci pozitivne šupljine ekvivalentne pozitivnim česticama).

## NUKLEARNE METODE ANALIZE MATERIJALA

Nuklearna nedestruktivna metoda analize materijala je izravna fizikalna metoda za detekciju, identifikaciju i kvantitativnu analizu materijala koji su prirodno radioaktivni, ili onih čija se aktivnost inducira pomoću različitih nuklearnih reakcija.

Nedestruktivna metoda mora biti točna i brza, a nedestruktivna u tom smislu da ne razara materijal kemijski. Nedestruktivne analitičke metode se dijele u dvije skupine:

1. aktivne metode analize materijala

2. pasivne metode

Aktivna metoda jest „aktivna“ u smislu induciranja aktivnosti u uzorcima ozračivanjem (bombardiranjem česticama ili fotonima) uzoraka. Inducirana aktivnost se detektira i analizira u svrhu kvantitativnog određivanja iznosa, sada radioaktivnog, u uzorku sadržanog materijala. Pobuđena aktivnost je karakteristična oznaka za svaku vrstu materijala, tako da je najprije potrebno pridruživanje linija opaženih u spektru korospondentnim vrstama materijala, nakon čega slijedi kvantitativna analiza.

Nuklearne reakcije, koje se koriste u aktivacijskog analizi, date u kratkom pregledu su:

- reakcije inducirane termičkim i sporim neutronima (radioaktivni uхват, fisija, ostale reakcije)
- reakcije koje izazivaju nabijene ili neutralne čestice srednjih energija (iznad kulonske barijere, od nekoliko MeV pa do nekoliko stotina MeV) : (p,n), (p,pn), (p,2n), (p,p2n), (p,α), (n,p), (n,pn), (n,2p), (n,n2p), (n,α)
- visoko energijske nuklearne reakcije neutronima i protonima (intranuklearne kaskade koje daju spalacijske produkte, visoko-energijske fisije, reakcije s fragmentima, stvaranje π-mezona)
- reakcije deutronima i teškim ionima
- fotonuklearne reakcije inducirane γ-zrakama

Uobičajeno je aktivne analitičke tehnike zasnovane na nuklearnim reakcijama dijeliti na :

1. aktivacijsku analizu

2. analizu promptnog zračenja

Aktivacijska analiza koristi navedene reakcije u kojima se materijali u uzorku transformiraju u radioaktivne vrste s karakterističnom energijom koja se zatim mjeri.

U promptnoj analizi, element koji je sadržan u uzorku, detektira se kroz njegovo karakteristično zračenje koje se emitira istodobno dok upadajući projektili aktiviraju atome analiziranog elementa.

Od aktivnih tehnika, najveći naglasak dajemo na nuklearno-spektroskopske metode. Obraditi ćemo analizu materijala po karakterističnim  $\gamma$ -zrakama.

## ANALIZA MATERIJALA PO KARAKTERISTIČNIM $\gamma$ -ZRAKAMA

$\gamma$ -zračenje je elektromagnetsko zračenje koje dolazi iz pobuđenih stanja atomskih jezgri. Ono je polarizirano, opisano prijelaznom vjerojatnošću i kutnom raspodjelom. Budući da se u kvantnoj mehanici jezgra uzima kao sustav nukleona opisanih spinom i orbitalnom (kutnom) količinom gibanja, koji se vektorski slažu u ukupnu količinu gibanja vrtnje, te onda u jezgri razlikujemo nuklearno-energijska stanja određena energijom, ukupnom količinom gibanja, vrtnje i paritetom, koja su zaposjednuta nukleonom. Prema tome modelu, mehanizam nastajanja  $\gamma$ -zračenja je : nukleon iz energijski višeg stanja, uz pretpostavku nepopunjenog nižeg stanja, prelazi u to niže stanje uz emisiju  $\gamma$ -kvanta energije jednake razlici energija (model sličan elektronskom, samo su nuklearne energije znatno veće, a kvantitativna analiza daleko teža).

Budući da jezgra mora biti definirano kvantno stanje, onda je jedini način koji omogućuje prijelaz u niže stanje, prethodna pobuđenost. Svaki prijelaz nije dopušten, a „uređenost“ prijelaza određuju izbirna pravila E-I i M-I multipolne prijelaze. Energija nuklearnog stanja je karakteristična veličina, pa su i dopušteni prijelazi, odgovarajući tome, karakteristične veličine. Energija pobuđenog stanja, koja se

prijelaznom u osnovno stanje zrači ( $T_{1/2} = \ln \frac{2}{\lambda}$ )

nije oštra zbog konačnog vremena trajanja poluživota. Njezina širina je radi toga povezana s poluživotom

$T_{1/2}$  relacijom neodređenosti ( $\Delta E \cdot T_{1/2} \geq \frac{h}{2 \cdot \pi}$ ), što se uz statističke utjecaje u detektoru, u spektralnoj

slici pokazuje kao puna širina na polovici maksimuma („FWHM“).

Svaki nuklid ima određeni broj pobuđenih stanja s određenim energijama, pripadajućim vremenima poluraspada i relativnim udjelom svakog stanja u cjelokupnome raspadu. To su reprezentativne, karakteristične energije i nuklid, prelazeći u stabilno stanje emitira  $\gamma$ -foton, koji može poslužiti identifikaciji i analizi elemenata u kojem je nastao. Analiza materijala, na osnovu karakterističnog  $\gamma$ -zračenja, pretpostavlja najprije poznavanje karakterističnih  $\gamma$ -prijelaza u elementima i prikladni detektorsko-elektronički sustav koji će pokazati spektralni sastav elemenata (intenzitet i energije linija).

Element je reprezentiran ili jednom karakterističnom energijom, ili s više. U analizi, irelevantno od broja linija, treba se osloniti na prominentne  $\gamma$ -linije, koje je moguće i kvalitativno i kvantitativno analizirati.

Karakteristične energije  $\gamma$ -linija i njihove pripadajuće konstante se utabličuju po kriteriju vremena poluživota ili redom po nuklidima, u raznim časopisima ili godišnjacima, odnosno u softverskim bazama-datotekama podataka (tzv. kalibracijske datoteke za  $\gamma$ -spektrometriju).

## Aktivna i pasivna metoda analize materijala po karakterističnim $\gamma$ -zrakama

Pasivna analiza materijala po karakterističnim  $\gamma$ -zrakama se temelji na prirodnoj radioaktivnosti izotopa. Ona je po sebi jednostavnija, od bilo koje aktivne, ali nije primjenljiva za mnoge materijale. U principu,  $\gamma$ -spektar radioaktivnog elementa sadrži gotovo sve informacije potrebne za detaljan opis zračenja i povijesti zračenja (radioaktivnosti) elementa. Omjeri aktivnosti radioaktivnih elemenata u nekom trenutku, zbog različitih konstanti raspada, mogu biti točna oznaka za relativnu količinu elemenata, uz pretpostavku da se točno mogu mjeriti (detektor dobrih svojstava – rezolucije i efikasnosti).

Analiza  $\gamma$ -zračenja bilo „pasivnog“, bilo „aktivnog“, i sve njezine prednosti pridolaze iz, danas razvijene  $\gamma$ -spektroskopije (Ge(Li), Si(Li), intrinzični Si i Ge, detektori na kriogenim temperaturama) kojom se postižu kvalitetni spektri uzoraka.  $\gamma$ -zračenje duboko prodire u materijale, ili može doći iz unutrašnjih slojeva materijala i tako pridonosi informaciji o sastavu po dubini materijala. Nadalje,  $\gamma$ -metoda može biti vremenski kratka, vrlo točna i danas se automatizira primjenom računala u postupku.

## Apsorpcioni procesi $\gamma$ -zračenja u materijalu

Procesi interakcije  $\gamma$ -zračenja u materijalu su procesi apsorpcije i procesi raspršenja, čija zastupljenost i vjerojatnost ovisi o energiji  $\gamma$ -zračenja i svojstvima materijala.

Foton, uglavnom, gubi energiju kroz tri osnovna procesa :

- FOTOELEKTRIČNI EFEKT** je dominantan na nižim energijama, za nisko-energijske  $\gamma$ -fotone. Cijela energija fotona se apsorbira od strane vezanog elektrona, jer se drugi dio „utrošio“ na energiju vezanja. Dodatna pojava su X-zrake i Augerovi elektroni, pojave koje se mogu dogoditi u elektronskom sustavu atoma na kojemu se zbije fotoefekt. Augerov proces je neradijativan prijelaz u već ioniziranom atomu, pri kojem atom prelazi u niže stanje energije, izbačen Augerov elektron odnosi razliku energija, ostavljajući atom dvostruko ioniziranim (npr. atom u LL ili LM stanju). Emisija X-zrake je češća pojava u teškim elementima, a Augerovih elektrona u lakšim. Energija K X-fotona je  $(E_{bK} - E_{bL})$ , a pripadajućeg  $E_{bK} - E_{bL} \geq E_{bL}$  Augerovog elektrona L-ljuske  $E_{bK} - 2E_{bL}$ .



Dodatne X-zrake i Augerovi elektroni se, općenito, mogu apsorbirati u detektoru i generirati događaje koji se približavaju primarnome spektralnom vrhu (u tom slučaju, vrh je vjerodostojan doziv apsorbiranoj energiji). Ako se međutim, sekundarne X-zrake ne apsorbiraju u detektoru, spektralni vrh će biti umanjnjen za tu korespondentnu energiju. Ovaj slučaj je izvor „izmicajućih vrhova“ (escape peak), koji se mogu opaziti na donjem dijelu energetske skale u mnogim  $\gamma$  ili X-spektrima.

Fotoelektrična apsorpcija se događa s  $\approx \frac{Z^5}{E^{3,5}}$ .

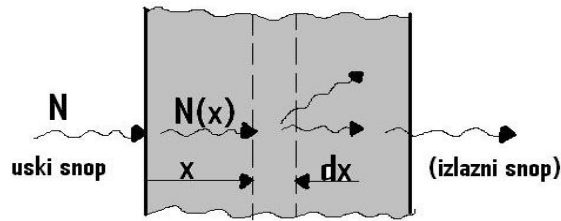
2. **COMPTONOV RASPRŠENJE** – pri toj pojavi upadajući foton se raspršuje na elektronu u volumenu detektora predajući mu dio energije, a samje skrenut od početnog smjera s ostatkom energije. Vjerojatnost Comptonskog raspršenja, za enerije pri kojima je pojava dominantna (od otprilike 100 keV pa do nekoliko MeV-a), opada približno  $\frac{1}{E}$ .
3. **STVARANJE PAROVA** – u pojavi foton nestaje, a stvara se elektron-pozitron par. Budući da je energija stvaranja 1,022 MeV, pojava nije moguća za niže energije, a postaje dominantnom (udarni presjek raste) porastom energije upadajućeg fotona ( $>10$  MeV). Proces je izrazitiji u materijalima s većim rednim brojem ( $\sim Z^2$ ). Vjerojatnost izmicajućih vrhova je velika zbog moguće anihilacije stvorenog pozitrona s elektronom u detektoru. Energija anihilacije od 1,022 MeV se pojavljuje kao dodatni par od 511 keV  $\gamma$ -zraka emitiranih u suprotnim pravcima, koje mogu ili ne biti apsorbirane u detektoru. Stoga, spektar visokoenergijskih  $\gamma$ -zračenja sadržijednostruko ili dvostruko izmicajuće vrhove uz uobičajene spektralne vrhove. Relativna veličina takvih vrhova zavisna je od vjerojatnosti apsorpcije anihilacijskog zračenja u detektoru, što je ovisno o veličini detektora i njegovoj geometriji.

Apsorpcija je u materijalu debljine  $x$  opisanih procesima, slijedi eksponencijalni zakon :

$$I = I_0 \cdot e^{\frac{-N_A}{A \cdot \left( \sigma_f + Z\sigma_k + \sigma_p \right)} x}, \quad I = I_0 \cdot e^{-\mu x}$$

uz oznake :  $I_0$  je upadajući fotonski tok,  $N_A$  je Avogadrov broj,  $A$  je maseni broj, a  $\mu$  linearni koeficijent apsorpcije ( $cm^{-1}, cm^2 / g, cm^2 / atom, cm^2 / elektron$ ),  $I$  je fotonski tok koji izlazi iz materijala.

Monoenergijski  $\gamma$ -fotoni se prigušuju eksponencijalno u homogenoj meti (materijalu). Pogledajmo prolazak monoenergijskog uskog snopa („pencil beam“) kroz sloj (stijenu konačne debljine) ili štit materijala. Pojedini fotoni iz ulaznog snopa  $N_0$  prolazeći kroz sloj se raspršuju ili apsorbiraju. Broj fotona koji dolaze u točku  $x$  bez međudjelovanja s materijalom jest  $N(x)$ . Broj fotona  $dN$  koji će međudjelovati u sljedećem malom sloju  $dx$ , daje nam diferencijalnu jednadžbu koja opisuje i odgovarajuće eksponencijalno rješenje :



**Slika 10 :** Uski snop  $N_0$  monoenergijskih  $\gamma$ -fotona upada na sloj konačne debljine.

Broj fotona koji su prodrli do točke  $x$  bez međudjelovanja s materijalom iznosi

$$N(x) = N_0 \cdot e^{-\mu x} \text{ gdje je } \mu \text{ linearni koeficijent apsorpcije.}$$

$$dN = -\mu N dx \xrightarrow{\text{integriranjem}} \int_{N_0}^{N(x)} \frac{dN}{N} = -\int_0^x \mu dx \rightarrow N(x) = N_0 \cdot e^{-\mu x}$$

Vidimo da faktor  $e^{-\mu x}$  pokazuje vjerojatnost da okomito upadajući fotoni prolaze kroz sloj  $x$  bez interakcije (omjer  $\frac{N(x)}{N_0}$ ). Dakle, faktor  $e^{-\mu x}$  opisuje onaj dio (frakciju) „nesudarajućih“ fotona koji prolaze slojem.

U dozimetrijskim promjenama i raznolikim mjerenjima, valja razlikovati tok fotona od gustoće toka fotona i odgovarajućim energijskim veličinama :

$\Phi [m^{-2}]$  = tok fotona (fluence) ili broj fotona po jedinici površine ravnine postavljene okomito na snop.

$\dot{\Phi} = \frac{d\Phi}{dt} [m^{-2}s^{-1}]$  = gustoća toka fotona (flux density ili fluence rate) ili broj fotona po jedinici površine po jedinici vremena.

Tok energije  $\Psi$  (energy fluence) i odgovarajuća energijska gustoća toka  $\dot{\Psi}$  (intenzitet, energy flux density), gdje je energija fotona dana izrazom  $E = h\nu$ , definiraju se kao :

$$\Psi = \Phi \cdot h\nu [m^{-2}] \quad \text{ i } \quad \dot{\Psi} = \dot{\Phi} \cdot h\nu [m^{-2}s^{-1} = Wm^{-2}]$$

U  $\gamma$ -spektrometriji definiraju se različiti kriteriji za raspoznavanje statistički značajnog spektralnog vrha. Jedan od široko prihvaćenih kriterija zahtjeva da broj događaja  $P_C$  u spektralnog vrhu (površini vrha) mora zadovoljavati nejednadžbu :

$$\frac{P_{\check{C}}}{\sqrt{P_B}} > \sqrt{6}$$

gdje je  $P_B$  broj impulsa (površina) pozadinskog zračenja ispod vrha u spektru karakterističnog  $\gamma$ -zračenja.

### HPGe : High-purity germanium detector (Ge – detektor viskoke čistoće)

Ge kristal s ugrađenim pretpojačalom je u evakuiranom kućištu, a cijeli uređaj se hladi u kristalu (u kapljeni dušik na 77 K). Detektor se proizvodi u planarnoj ili koaksijalnoj izvedbi



**Slika 11:** Koaksijalne izvedbe HPGe detektora

Na slici 11. su primjeri koaksijalnih Ge-detektora. Ovisno o volumenu kristala, detektori se primjenjuju u  $\gamma$ -spektroskopiji i analizi uzoraka (materijala, meta) od relativno niskih (100 keV) do visokih  $\gamma$ energija (do 10 MeV).



**Slika 12 :** Pokretni HPGe višekanalni analizator

Na slici je pokretni HPGe višekanalni analizator, za brzo mjerenje („monitoring“) i identifikaciju nuklida („nuclide ID“). Uređaj je podržan unutrašnjom memorijom i sučeljem za računalne (softverske) aplikacije.

### ZADACI :

1. X-cijev operira pod naponom od 100 kV, a struja iznosi 50 mA.

Izračunajte :

a) Koliko elektrona u sekundi udara u anodu?

b) Kolika je snaga cijevi?

c) Kolika je najmanja valna duljina X-fotona u neprekinutom X-spektru koju daje cijev?

Rješenje :

a)  $I=50\text{mA}$

$$I = \frac{\Delta Q}{\Delta t} \Rightarrow I = \frac{N \cdot e}{\Delta t} \quad \text{za } \Delta t = 1 \text{ sekunda}$$

$$N = \frac{I}{e} = \frac{50 \cdot 10^{-3}}{1,602 \cdot 10^{-19}} = 3,12 \cdot 10^{17} \text{ s}^{-1}$$

$$\text{b) } P = U \cdot I = 100 \cdot 50 = 10^5 \cdot 50 \cdot 10^{-3} = 5 \text{ kW}$$

c) koristimo formulu (iz predavanja):

$$\lambda_{\text{A}} = \lambda_{\text{min}} = \frac{12400}{E_{\text{eV}}} = \frac{12400}{10^5} = 0,124 \text{ \AA}$$

$$\lambda_{\text{min}} = 0,124 \text{ nm}$$

2. Karakteristična X-linija bakra ima energiju 8,05 keV. Odredite karakteristični vrh  $K_{\alpha 1}$  kositra!

Rješenje : koristit ćemo Moseleyevu formulu :

$$h\nu = 13,6 \text{ eV} \cdot (Z-1)^2 \cdot \left( \frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2} \right), \text{ gdje su } k=1; m=2 \text{ za } 2p_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2} \text{ prijelaz.}$$

$$Z(\text{Cu})=29$$

$$Z(\text{Su})=50$$

$$13,6 \cdot \frac{Z_{\text{Cu}}^2 - 1}{4} = 8,05 \text{ keV}$$

$$13,6 \cdot \frac{Z_{\text{Su}}^2 - 1}{4} = E_X(\text{Su})$$

$$E_X(\text{Su}) = 8,05 \text{ keV} \cdot \frac{Z_{\text{Su}}^2 - 1}{Z_{\text{Cu}}^2 - 1} = 8,05 \text{ keV} \cdot \left( \frac{49}{28} \right)^2 = 24,65 \text{ keV}$$

3. X-cijev u medicinskim primjenama operira na 80 kV vršnog napona. Kolika je valna duljina fotona koja odgovara najvećoj energiji X-zračenja?

$$(\lambda_{\min} = 0,155 \text{ \AA} = 0,155 \cdot 10^{-10} \text{ m})$$

4. Energije vezanja elektrona K, L i M ljusci nekog elementa iznose redom : 8979 eV, 951 eV i 74 eV. Koje su energije karakterističnih  $K_\alpha$  i  $K_\beta$  linija u X-spektu elemenata? Koji je to element (Z=?).

$$(K_\alpha = 8,028 \text{ keV}, K_\beta = 8,905 \text{ keV} ; \text{Cu})$$

5. Kalibracijski izvor  $^{137}\text{Cs}$  se tipično koristi u  $\gamma$ -spektroskopskim mjerenjima. Izvor je spremljen u laboratoriju u odgovarajućem pretincu. Gustoća toka fotona u zraku u točki u blizini gdje je izvor smješten iznosi  $5,14 \cdot 10^7 \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1}$ . Izračunajte :

a) energijsku gustoću toka u promatranoj točki,

b) izračunajte apsorbiranu dozu zračenja (apsorbirana energija po jedinici mase u toj točki ( $\dot{D} = \dot{\Psi} \frac{\mu}{\rho}$ ), gdje su  $\mu$  = linearni koeficijent apsorpcije i  $\rho$  = gustoća zraka)).

Energija fotona iz jezgre  $^{137}\text{Cs}$  jest  $E_\gamma = h\nu = 0,622 \text{ MeV}$  (iz karte nuklida). Maseno energijski

koeficijent  $\frac{\mu}{\rho} = 0,030 \text{ cm}^2 \text{ g}^{-1}$  (za zrak).

$$a) \dot{\Psi} = \dot{\Phi} \cdot h\nu = 5,14 \cdot 10^7 \cdot 0,622 = 3,40 \cdot 10^7 \text{ MeVm}^{-2} \text{ s}^{-1} = 3,40 \cdot 10^3 \text{ MeVcm}^{-2} \text{ s}^{-1}$$

b) Apsorbirana doza zračenja, prema definiciji iznosi :

$$\dot{D} = \dot{\Psi} \frac{\mu}{\rho} = 3,40 \cdot 10^3 \cdot 0,030 = 102 \text{ MeVg}^{-1} \text{ s}^{-1}$$

$$\dot{D} = 102 \text{ MeV(g s)}^{-1} \cdot 1,062 \cdot 10^{-13} \text{ J MeV}^{-1} \cdot 10^3 \text{ gkg}^{-1} = 1,63 \cdot 10^{-8} \text{ Jkg}^{-1} \text{ s}^{-1} = 0,0587 \text{ mGyh}^{-1}$$

Jedinica za apsorbiranu dozu jest  $1 \text{ Gy} = 1 \text{ Jkg}^{-1}$ , zove se grej (Gy, Gray).

# ELEKTRIČNA VODLJIVOST I TEORIJA VRPCI ZA KRISTALNU REŠETKU

## Fenomenološke osnove vodljivosti

Kad nema polja, elektroni popunjavaju sva stanja do  $E_{maks} = E_F$ . Stanja s pozitivnim valnim vektorom  $+\vec{k}$  ima podjednako kao i s  $-\vec{k}$ . Podjednaki broj elektrona putuje u jednom i u drugom smjeru : srednja brzina im je nula.

Primjenjenim poljem  $\vec{\mathcal{E}}$  elektroni se ubrzavaju zbog sile  $-e \cdot \vec{\mathcal{E}}$ . Sferna razdioba se pomiče u smjeru sile i većina elektrona putuje udesno. Postoji električna struja.

**\*\*\*\*\*SLIKA\*\*\*\*\***

Zašto se zbog djelovanja stalne sile elektroni ne ubrzaju sve više i više (razdioba sve asimetričnija), a struja sve veća?

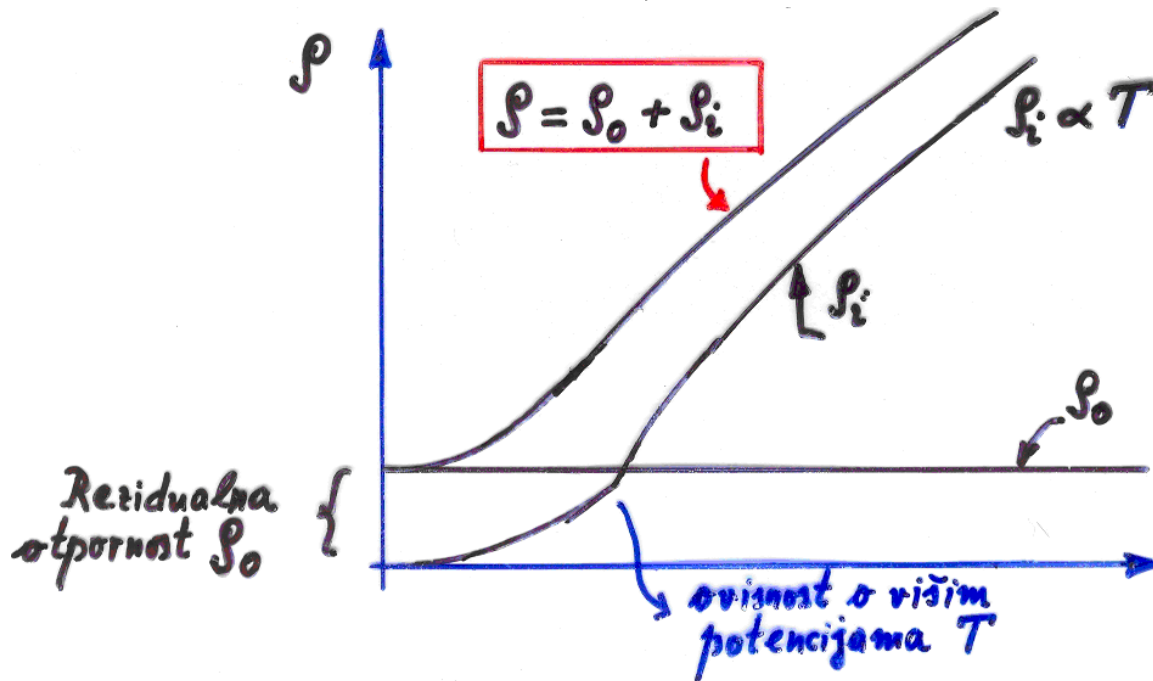
Primjenom polja vrlo brzo se uspostavlja stalna struja, čija vrijednost ovisi o polju  $\vec{\mathcal{E}}$ . Elektroni oko Fermijeve površine doživljavaju raspršenja u različitim procesima i popunjavaju prazna stanja na lijevoj strani Fermijeve površine s nižim k-vrijednostima i energijom.

$$(\text{gustoća struje}) \ j = \delta \cdot \mathcal{E} \quad (\text{vodljivost}) \ \delta = \frac{1}{\rho (= \text{otpornost})}$$



## Električna otpornost

- zbog toplinskog titranja rešetke elektroni se raspršuju na fononima  $\Rightarrow \rho_i$  (i = idealno)
- nečistoće i nesavršenosti u kristalnoj rešetki,  $\rho_0$



$\rho_i \equiv$  oznaka idealno jer je ova otpornost nazočna i u idealno čistom kristalu

## Fermi-Diracova razdioba

Potpuni oblik Fermi-Diracove razdiobe jest :

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E - E_F}{k_B T}} + 1}$$

vrijedi za **FERMIONE** (čestice s polucijelim spinom)

Ona je kvantnostatistička razdioba jer se zasniva na Paulijevu principu. Vjerojatnost  $f(E)$  označava zaposjednutost određenog kvantnog stanja energije  $E$  elektronom. Na nultoj temperaturi vrijedi :

$$f(E) = 1 \text{ ako je } E \leq E_F$$

$$f(E) = 0 \text{ za } E > E_F$$

Na nekoj konačnoj temperaturi vjerojatnosti zaposjednutosti iznosi (vidi sliku) :

$$f(E) = \frac{1}{e^{(E-E_F)/kT} + 1}$$

$$T_1 < T_2$$

iz slike i formule slijedi:

$$E = E_F \rightarrow f(E) = \frac{1}{2}$$

na bilo kojoj temperaturi,  $T > 0$

$$\rightarrow E = kT$$

Kad se toplina predaje elektronskom sustavu, tada elektroni primaju energiju u obrocima  $kT$ . Ne mogu više ostati u istome nivou zbog Paulijeva principa i podižu se u više nivoe ako su oni nepopunjeni. Elektroni u nivoima najbližim Fermijevom doživljavaju takvu transformaciju seobe, što se i vidi sa slike!

Vjerojatnost zaposjednutosti je vrlo osjetljiva o temperaturi elektronskog plina, o veličini  $kT$ . Zato dajemo slijedeći podatak, koristan u izračunavanju  $f(E)$  :

$$kT = 1,3806 \cdot 10^{-23} \text{ [K}^{-1} \cdot \text{T K]} = 8,6174 \cdot 10^{-5} \text{ [eVK}^{-1} \cdot \text{T K]}$$

Funkcija Fermi-Diracove razdiobe fundamentalno utječe na gustoću stanja na konačnim temperaturama. Broj stanja u elektronskom plinu se mijenja uračunavanjem vjerojatnosti zaposjednutosti stanja  $f(E)$ .

Važna karakteristika Fermi-Diracove razdiobe koja ima značajnu primjenu u razumjevanju svojstva poluvodiča i poluvodičkih karakteristika jest svojstvo simetrije/antisimetrije s obzirom na  $E_F$  :

$$f(E_F - E') = 1 - f(E_F + E')$$

*Dokaz:*

$$f(E_F - E') = \frac{1}{e^{(E_F - E' - E_F)/kT} + 1} = \frac{1}{e^{\frac{-E'}{kT}} + 1}$$

Ako je  $E' \gg kT$ , vrijedi aproksimacija :

$$f(E_F - E') = \frac{1}{e^{\frac{-E'}{kT}} + 1} \approx 1 - e^{\frac{-E'}{kT}}$$

$$1 - f(E_F - E') = 1 - \frac{1}{e^{\frac{-E'}{kT}} + 1} = \left| E' \gg kT \right| = 1 - e^{\frac{-E'}{kT}}$$

Drugo važno svojstvo Fermijevog nivoa jest njegova (ne)ovisnost o temperaturi. Fermijev nivo neznatno „šeta“ promjenom temperature. Tek pri vrlo visokim temperaturama, događa se pomak  $E_F$  prema nižim vrijednostima, prema relaciji :

$$E_F(T) = E_{maks} \left[ 1 - \frac{\pi^2}{12} \left( \frac{kT}{E_{maks}} \right)^2 \right]$$

$$E_{maks} = E_F(0)$$

## Bose-Einsteinova statistika

Ona je drugi tip kvantne statistike u kojoj se čestice ne razmještaju tako da ih ograničava Paulijev princip. Vrijedi za čestice s nultim ili cjelobrojnim spinom (fononi, fotoni, pioni...). Ovu statistiku nećemo detaljno matematički izvoditi! Sličnim postupkom kao i kod Fermi-Diracove razdiobe dobiva se :

$$\text{najvjerojatnija makroskopska razdioba } \frac{n_i}{N_i} = \frac{1}{e^{a+bE_i} - 1}, \quad b = \frac{1}{kT}$$

fononi i pioni → nulti spin

fotoni → cjelobrojni spin ( $1\hbar$ )

Koristan oblik Bose-Einsteinove razdiobe koji se može primjeniti na zračenje crnog tijela glasi :

$$F(E) = \frac{1}{e^{(E-a)/kT} - 1}$$

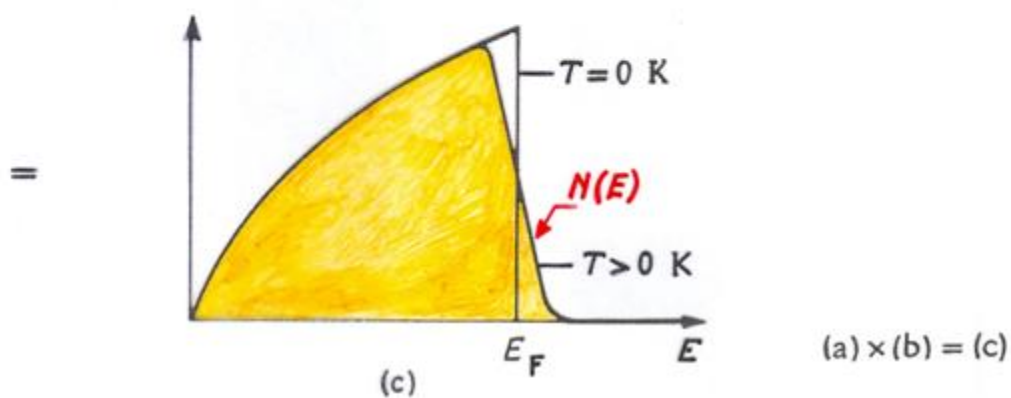
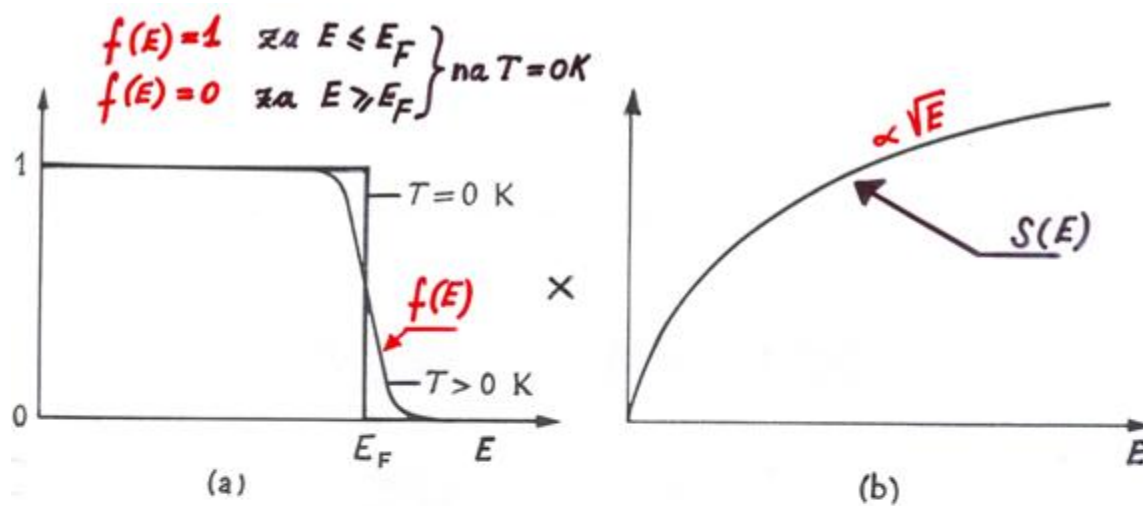
Bose-Einsteinova razdioba se vrlo zgodno može primjeniti na problem zračenja crnog tijela tako da kvantno-statistički promatramo njegove fotone. Pri tome valja uzeti u obzir da fotoni imaju cjelobrojni spin ( $1\hbar$ ) i da njihov broj nije stalan!

To znači da konstanta **a** u Bose-Einsteinovoj razdiobi iščezava. Također treba uzeti u obzir dvije moguće orijentacije polarizacije fotona zbog čega se u račun broj fotonskih stanja po frekvencijskom intervalu udvostručuje. Uz ove uvjete lako se dobiva poznati Planckov zakon zračenja.

U naše doba imamo fantastični razvoj u polju BEC – Bose-Einstein kondenzata, koji su doveli do Nobelove nagrade potkraj 20. stoljeća. Veliku ulogu u istraživanju BEC-stanja ima laserska tehnologija.

S druge strane, ostaje problem kvantne koherencije i njezinog narušenja odnosno očuvanja u BEC-stanjima.

## GUSTOĆA STANJA NA KONAČNIM TEMPERATURAMA



$$N(E) = S(E) \cdot f(E)$$

(c) (b) (a)

$$N(E) = \frac{\Pi}{2} \cdot \left(\frac{8m}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot V \cdot \sqrt{E} \cdot f(E)$$

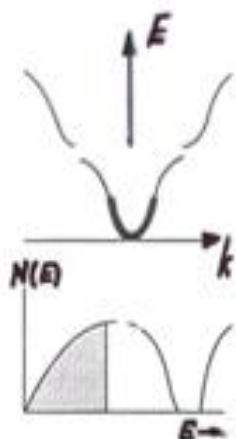
$$f(E) = \frac{1}{e^{(E-E_F)/kT} + 1}$$

Funkcija Fermi-Diracove razdiobe

## METALI, IZOLATORI, POLUVODIČI

(objašnjenje električkih svojstava u okviru teorije vrpce, Brillouinovih zona)

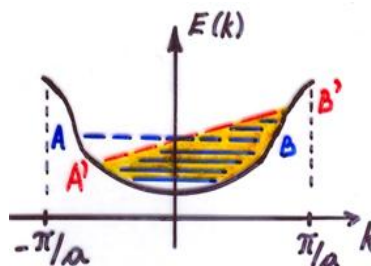
METALI:



Broj dopuštenih vrijednosti od  $k$  jednak je  $N_i$  ( $\equiv$  broj iona u kristalu) :

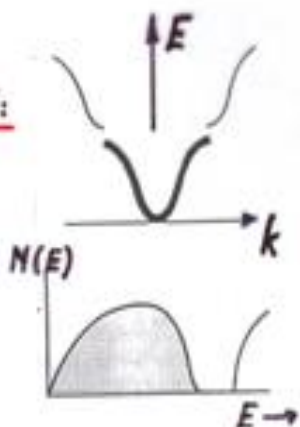
$2N_i \equiv$  ukupni broj stanja u svakoj zoni spin (vrpce)

Ako metal ima 1 vodljivi elektron po atomu, donja polovica vrpce bit će popunjena.



Nesimetrije u količinama gibanja i naboju moguće su samo u NEPOPUNJENIM VRPCAMA.

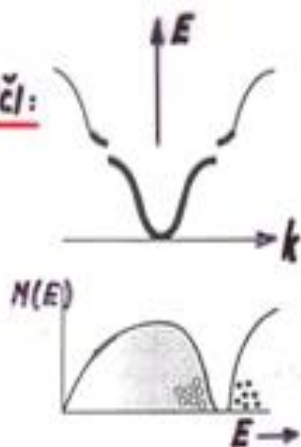
IZOLATORI:



Kad su vrpce popunjene (paran broj elektrona po atomu), promjenom polja  $\vec{E}$  kristalom ne može teći struja.

Energijski razmak do iduće zone (vrpce) može biti nekoliko eV, što je puno veće od toplinskih energija (reda desetak meV). Prema tome elektroni ne mogu preskočiti energijski razmak od dna više vrpce : materijal je izolator.

POLUVODIČI:



Ako ZABRANJENI POJAS nije velik, na primjer 1eV ili manji, manji broj elektrona na sobnim temperaturama može doći u višu vodljivu vrpce i teče struja.

Vodljivost poluvodiča bitno ovisi o temperaturi.

## FENOMENOLOŠKA SVOJSTVA POLUVODIČA

### Električna vodljivost poluvodiča. Pokretljivost nosilaca.

Vodljivost poluvodiča  $\delta$  je složenija nego u metalima. Raspršenje nosilaca ovisno je o temperaturi, ali i broj energijski spektar ovisi o  $T$ .

$$\mu = \frac{vu}{\varepsilon} \equiv \text{pokretljivost nosilaca } [m^2V^{-1}s^{-1}]$$

$$\mu^{-1} \sim \text{vjerojatnost raspršenja nosioca}$$

- procesi raspršenja zbog vibracije rešetke (fonološko raspršenje nosilaca):

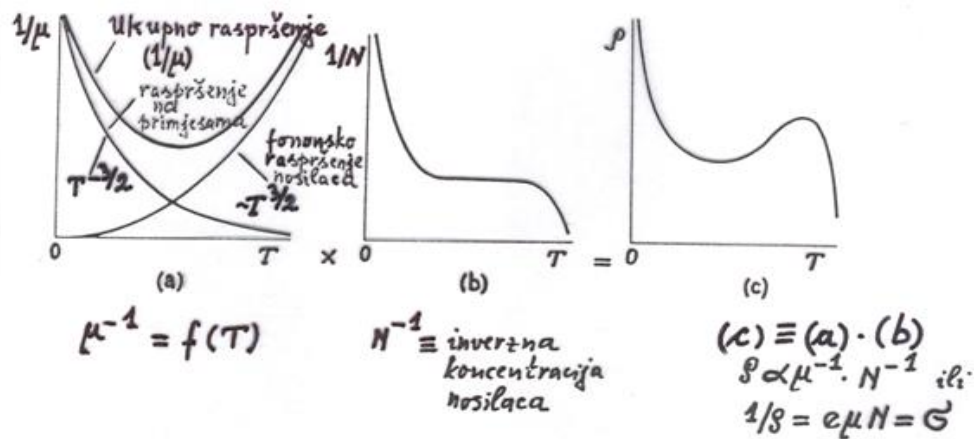
$$\propto T^{3/2}$$

- raspršenje na primjesama u poluvodiču:

$$\propto T^{-3/2}$$

Ovi efekti nisu baš najbolje utvrđeni : variraju od uzorka do uzorka (efektivne prilagodbe ili "fitovi" mjerenja).

U kvalitativnoj krivulji  $\mu^{-1} = f(T)$  postoji minimum



## Rekombinacija nislaca i zamke nosiocima:

- Život nosilaca je nakon pobuđivanja relativno dug :  $\langle t \rangle \lesssim 10^{-4} s$  za Ge i Si. Izravna rekombinacija šupljina elektrona : mali vjerojatna jer se oboje brzo gibaju i jer bi morali biti na istome mjestu u trenu rekombinacije. Osim toga, Si i Ge su tzv. materijali neizravnog pobuđivanja.
- Vrlo vjerojatan proces : atomi primjesa ili drugih nečistoća kao usidrene zamke s tzv. "dubokim" stanjima unutar zabranjenog pojasa "čekanja" dok ne naiđu nosioci (elektron ili šupljina) da bi najprije uletjeli u zamku i potom se rekombinirali.

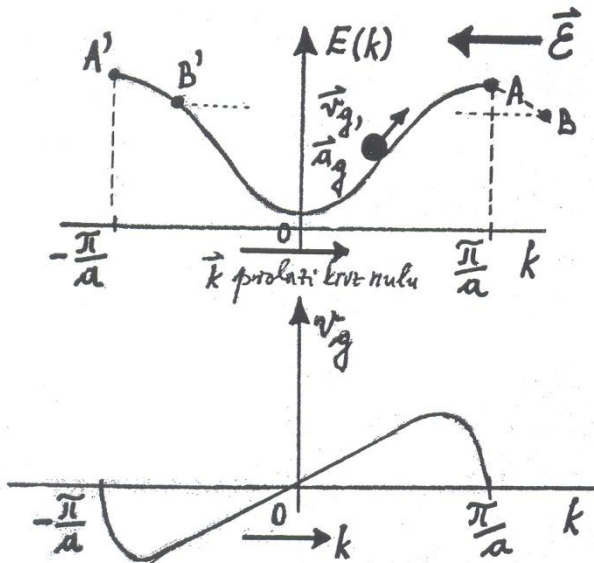
## EFEKTIVNA MASA ELEKTRONA

(skalarna efektivna masa  $m^*$ )

Gibanje slobodnog elektrona, pod djelovanjem električnog polja  $\vec{E}$ , potpuno je opisano telacijom iz Newtonove dinaike :

$$F = m \cdot \vec{a}, \quad e\vec{E} = m\vec{a}, \quad E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \cdot k^2}{2m}$$

Međutim gibanje elektrona u kristalnoj rešetki se opisuje Blochovom funkcijom. Zvisnost  $E$  ok  $k$  nije poput one za slobodni elektron. Radi se o "Blochovom elektronu" i karakterističnoj zakrivljenosti energije koja za prvu Brillounovu zonu izgleda kao na slici : Primijenimo li električno polje na kristal, "Blochov elektron" se ubrzava. Brzina i akceleracija elektrona su određene valno-mehaničkim veličinama  $v_g$  i  $a_g$  :



$$v_g = \frac{dv}{d(\frac{1}{\lambda})} = \frac{h \cdot dv}{h \cdot d(\frac{1}{\lambda})} = \frac{dE}{dp} \\ = |\vec{p} = \hbar \cdot \vec{k}| = \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{dE}{dk}$$

$$a_g = \frac{d}{dt} v_g = \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{d}{dt} \left( \frac{dE}{dk} \right)$$

Energija elektrona u kristalu se pod djelovanjem polja mijenja. Ona se mijenja za iznos rada električne sile :  $dE = e \cdot \varepsilon \cdot v \cdot dt$  pri čemu  $e\varepsilon v$  označava apsorbiranu snagu elektrona na



račun polja  $\vec{\mathcal{E}}$ . Gibanjem elektrona u k- prostoru pod djelovanjem polja  $\vec{\mathcal{E}}$ . Točke A i A' kao i B i B' su ekvivalentne. U točki B se vektor prevrće,  $\overrightarrow{kB'} = \overrightarrow{kB} - \frac{2\pi}{a}$ , poput fonona u u-procesima.

Budući da je brzina elektrona u rešetki grupna,  $v \equiv v_g$ , zakon očuvanja pišemo na sljedeći način:

$$v \equiv v_g$$

$$dE = e\varepsilon \cdot \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{dE}{dk} \cdot dt$$

$$\hbar \cdot dE \cdot \left(\frac{dE}{dk}\right)^{-1} = e \cdot \varepsilon \cdot dt$$

$$e\varepsilon = \hbar \cdot \frac{dE}{dt} \cdot \frac{dk}{dE} = \hbar \cdot \frac{dk}{dt} = \frac{d}{dt} (\hbar \cdot k)$$

Dakle je  $e\vec{\mathcal{E}} = \frac{d}{dt} (\hbar \cdot \vec{k})$  što je valjano i za trodimenzionalnu rešetku. Do ove smo relacije došli promatrajući kako  $\vec{p}$  i  $\vec{v}_g$  ovise o električnom polju  $\vec{\mathcal{E}}$ . Glede grupne akceleracije  $a_g$ , za ovisnost sile (polja) akceleracije postuliramo oblik 2. Newtonovog aksioma:  $e\vec{\mathcal{E}} = m^* \cdot a_g$

Iz ovog oblika definiramo dinamičku efektivnu masu  $m^* = \frac{e\vec{\mathcal{E}}}{a_g}$

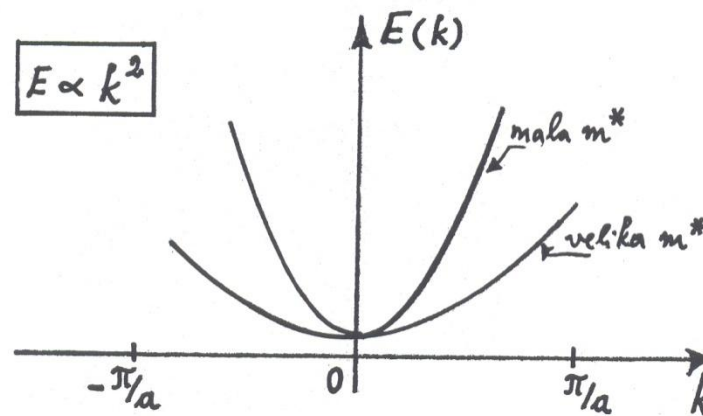
$$a_g = \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{d}{dt} \cdot \left(\frac{dE}{dk}\right) \longrightarrow a_g = \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{d^2E}{dk^2} \cdot \frac{dk}{dt}$$

$$e\varepsilon = \frac{d}{dt} (\hbar \cdot k) \longrightarrow \frac{dk}{dt} = \frac{e\varepsilon}{\hbar}$$

Prema tome, relacija za  $m^*$  glasi :

$$m^* = \frac{e\varepsilon}{\frac{1}{\hbar} \cdot \frac{d^2E}{dk^2} \cdot \frac{e\varepsilon}{\hbar}} = \frac{\hbar^2}{\frac{d^2E}{dk^2}}$$

Vidimo da se "Blochov elektron" tijekom gibanja kroz rešetku dok je pod utjecajem električnog polja "ponaša" kao slobodni elektron, ako za njegovo gibanje postuliramo 2. Newtonov aksiom. Sva valna svojstva karakteristična za takvo gibanje obuhvaćena su pojavom efektivne mase. Masa  $m^*$  je obrnuto proporcionalna zakrivljenosti energije  $E(k)$  u Brillouinovoj zoni: ako je zakrivljenost velika, tada je  $\frac{d^2 E}{dk^2}$  velika pa je masa mala i obrnuto (vidi sliku).



U blizini dna zone se ovisnost energije o valnom vektoru može aproksimirati kao  $E = \alpha \cdot k^2$ , gdje je  $\alpha$  prikladna konstanta. U ovom slučaju efektivna masa iznosi:

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\hbar \frac{d^2 E}{dk^2}} = \frac{\hbar^2}{2\alpha} \text{ jer je } \hbar \frac{d^2 E}{dk^2} = 2\alpha$$

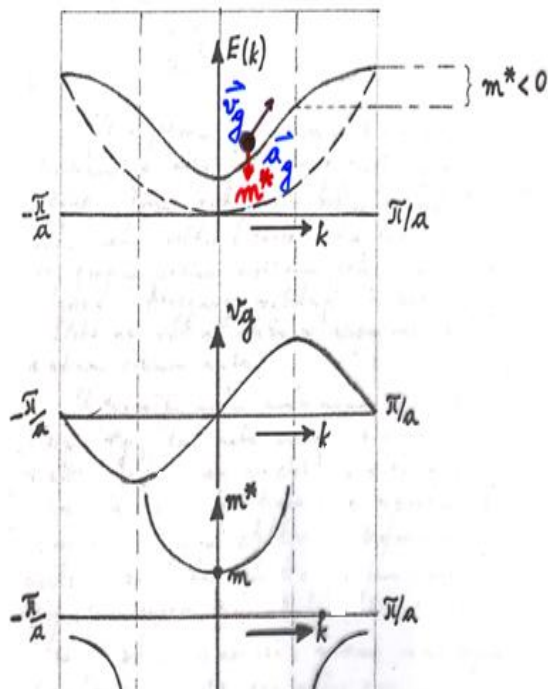
Ovisnost energije i valnog vektora se može ponovo napisati na sljedeći način:

$$E = \alpha \cdot k^2 = \left| \alpha = \frac{\hbar^2}{2m^*} \right| = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

što podsjeća na ovisnost energije i valnog vektora za slobodni elektron. U blizini dna zone efektivna masa  $m^*$  ima konstantnu pozitivnu vrijednost prema aproksimativnoj relaciji  $E = \alpha \cdot k^2$ . Takve vrijednosti za efektivnu masu  $m^*$  se, zapravo, i mjere u eksperimentalnim određivanjima efektivne mase.

## Svojstva i ponašanje efektivne mase u 1. Brillouinovoj zoni

Svojstva i ponašanje  $m^*$  najbolje ćemo razumjeti usporednim promatranjem  $E(k)$ ,  $v_g$  i  $m^*$  o valnom vektoru  $k$ , prema slici:



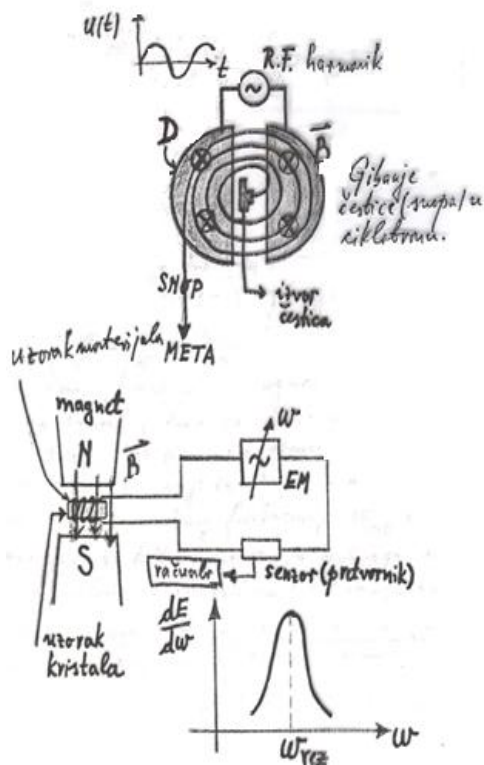
$$m^* = \frac{\hbar^2}{\frac{d^2 E}{dk^2}} \quad a = \frac{e\vec{E}}{m^*}$$

Iz dijagrama vidimo da se brzina elektrona povećava do otprilike polovice puta do ruba zone. Prema rubu zone brzina se usporava iako valni vektor  $\vec{k}$  raste. Na rubu zone je grupna brzina elektrona jednaka nuli. To odgovara Braggovoj refleksiji. Upadni i reflektirani val se slažu u stojni val s grupnom brzinom nula.

U području nakon maksimuma grupne brzine  $v_g$ , kad valni vektor i energija rastu, vidimo da se elektroni u kristalu usporavaju. Takvo je ponašanje suprotno od ponašanja slobodnog elektrona. Usporavanje elektrona znači da akceleracija ima smjer suprotan smjeru sile. Da bi oblik 2. Newtonovog zakona ostao isti, moramo valne pojave pridijeliti masi pa ona nužno mora imati negativan predznak da bi bilo:

$$\vec{F} = m \cdot \vec{a} = (-m) \cdot (-\vec{a}_g) = m^* \cdot \vec{a}_g$$

području prema rubu zone



## Mjerenje efektivne mase metodom ciklotronske rezonancije

Metoda ciklotronske rezonancije znači kružno gibanje čestice ako su brzina  $\vec{v}$  i magnetska indukcija  $\vec{B}$  okomiti : Nabijena čestica napušta ionski izvor brzinom  $v_0$  :

$$g \cdot v_0 \cdot B = \frac{m \cdot v_0^2}{r_0} , \quad \omega_0 = \frac{v_0}{r_0} = \frac{gB}{m}$$

Zbog izmjeničnog polja R.F. , sinkroniziranog uvijek nailasku čestice, dolazi do spiralnog gibanja pa možemo napisati :

$$\omega = \frac{v}{r} = \frac{eB}{m}$$

Stavimo li komad kristala u magnetsko polje tako da je  $\vec{B}$  okomito na kristal, tada će elektroni u kristalu oscilirati mijenjajući svoju energiju kako određuje oblik  $E(k)$  u prvoj Brillouinovoj zoni (slika ispod ciklotrona). Oscilacije su kružne i okomite na  $\vec{B}$ . Najveće oscilacije su na rezonantnoj frekvenciji  $\omega_{\text{rez}}$  : elektroni upijaju najviše energije iz EM oscilatora unutar Brillouinove zone u skladu s frekvencijom elektromagnetskog polja. To nam izravno omogućuje mjerenje veličine (ali ne i predznaka) efektivne mase prema formuli :

$$\omega_{\text{rez}} = \frac{eB}{m^*} \text{ i } m^* = \frac{eB}{\omega_{\text{rez}}}$$

Primjer : Efektivna masa elektrona u kristalu:

Oblik prve Brilluoinove zone se u blizini dna može aproksimirati jednačbom  $E(k) = E_0 - \frac{3}{2}A + Ak^2d^2$ . Izračunajte  $m^*$  i omjer  $m^*/m$  ako je konstanta rešetke  $d = d = 1.5 \cdot 10^{-10}\text{m}$  i  $A = 1.5 \text{ eV}$ .

$$d = 1.5 \cdot 10^{-10}$$

$$A = 1.5 \text{ eV}.$$

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\frac{d^2}{dk^2} E(k)}$$

$$E(k) = E_0 - \frac{3}{2}A + Ak^2d^2$$

$$\frac{d^2}{dk^2} E(k) = 2Ad^2$$

$$m^* = \frac{\hbar^2}{2Ad^2}, \quad \hbar = \frac{h}{2\pi}$$

$$m^* = \frac{h^2}{4\pi^2 2Ad^2} = \frac{6.626^2 \cdot 10^{-68}}{4\pi^2 \cdot 2 \cdot 1.5 \cdot 1.6 \cdot 10^{-19} \cdot 1.5^2 \cdot 10^{-20}}$$

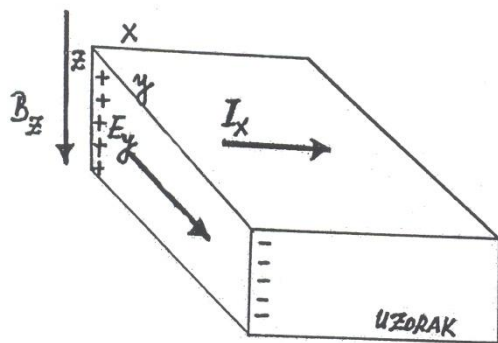
$$m^* = 1.0308 \cdot 10^{-30} \text{ kg}$$

$$\frac{m^*}{m} = 1.13 \quad (m = 9.11 \cdot 10^{-31} \text{ kg})$$

Primjer: Klasični Hallov efekt

Hallov koeficijent  $Rh = \frac{Vh \cdot d}{I \cdot B}$  (d je debljina uzorka a Vh Hallov napon) za aluminij jest  $-0.3 \cdot 10^{-10} \text{ VmA}^{-1}\text{T}^{-1}$ . Koliko elektrona efektivno po jednom atomu aluminija doprinosi struji (električnoj vodljivosti) kroz uzorak? (gustoća aluminija jest  $2700 \text{ kgm}^{-3}$  i atomska masa je 27).

Halova pojava vidi se iz slike. Ako je struja  $j_x = Nev_x$  teče uzduž osi x, okomito na magnetsko polje  $\vec{B_z}$ , Hallovo polje bit će uzduž osi y. Ako nema otklanjanja naboja, električna i magnetska sila su jednake:



$$e \cdot E_y = e \cdot v_x \cdot B_z = \frac{j_x \cdot B_z}{N} \quad (1)$$

Hallov koeficijent Rh se definira kao

$$Rh = \frac{Vh \cdot Z}{I_x \cdot B_z} \quad (2)$$

gdje je Vh Hallov napon (elektromotorna sila) a Z debljina uzorka. Budući da je

$$Vh = E_y \cdot y \text{ i } I_x = j_x \cdot y \cdot z \quad (3)$$

jednadžba (2) se može napisati kao:

$$Rh = \frac{E_y \cdot y \cdot Z}{j_x \cdot y \cdot B_z} = \frac{E_y}{j_x \cdot B_z} = \frac{1}{Ne} \quad (4)$$

U jednadžbi (4) N je broj vodljivih elektrona koji doprinosi struji kroz uzorak.

$$Rh = \frac{1}{Ne} \text{ i } N = N_{ef} \cdot \rho_{al} \cdot \frac{A0}{MAI} \quad (5)$$

$$N_{ef} = \frac{N}{\rho_{al} \cdot \frac{A0}{MAI}} = \frac{1}{Rh \cdot \rho_{al} \cdot \frac{A0}{MAI}}$$

Valja naglasiti ha Rh zavisi o predznaku e, tako da bi za istu struju antičestica ( $e^+$ ) imao suprotan predznak. Predznak dolazi iz vektorskog produkta ( $e\vec{v} \times \vec{B}$ ) i smjera električne sile, a ne iz definicije  $\vec{E} = -grad\vec{V}$ .

Zamjenom podataka ispada:

$$N_{ef} = \frac{1}{-0.3 \cdot 10^{-10} \cdot (-1.6 \cdot 10^{-19}) \cdot 2700 \cdot \frac{6.022 \cdot 10^{26}}{27}} = 3.46$$

Primjer : svojstva poluvodiča s primjesama

Izračunajte srednji slobodni put elektrona u germaniju N-tipa na sobnoj temperaturi (  $T = 300 \text{ K}$  ), ako je pokretljivost elektrona  $3600 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ . Računajte s  $m_e/m = 0.22$ , dok za brzinu elektrona u vodljivom pojasu uzmite srednju Maxwellovu brzinu  $v = (8kT/\pi m)^{1/2}$ .

$$T = 300 \text{ K}$$

$$\mu = 3600 \text{ cm}^2/\text{Vs}$$

$$\bar{v} = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}}$$

$$m_e/m = 0.22$$

Osnovnu relaciju za srednji slobodni put poluvodiča  $l = v_f \cdot \tau$ , koristimo tako da umjesto  $v_f$  koristimo Maxwellovu srednju brzinu  $\bar{v}$ .

$$l = \bar{v} \cdot \tau$$

$$v_u = \frac{e|\vec{E}|}{m^*} \cdot \tau \quad \frac{v_u}{|\vec{E}|} = \frac{e\tau}{m^*} = \mu \quad \tau = \frac{\mu m^*}{e}$$

$$l = \bar{v} \cdot \frac{\mu m^*}{e}$$

$$l = \frac{\mu m^*}{e} \cdot \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}} = |m^* = 0.22m| = \frac{\mu \cdot 0.22}{e} \cdot \sqrt{\frac{8kTm}{\pi}}$$

$$l = \frac{0.22 \cdot 3600 \cdot 10^{-4}}{1.6 \cdot 10^{-19}} \cdot \sqrt{\frac{8 \cdot 1.3806 \cdot 10^{-23} \cdot 300 \cdot 9,11 \cdot 10^{-31}}{\pi}} = 48.53 \cdot 10^{-9} m$$



Primjer: Vodljivost metala

Specifična vodljivost zlata je  $4.37 \cdot 10^7 \Omega^{-1}\text{m}^{-1}$ , a efektivni broj vodljivih elektrona po atomu jedan. Gustoća elektrona u zlatu je  $5.9 \cdot 10^{28}\text{m}^{-3}$ . Ciklotronska rezonancija u zlatu izmjerena je na frekvenciji  $1.15 \cdot 10^5 \text{ Mhz}$  uz jakost magnetske indukcije  $0.7 \text{ T}$ . Koliko je relaksacijsko vrijeme elektrona u zlatu ?

$$\delta = 4.37 \cdot 10^7 \Omega^{-1}\text{m}^{-1}$$

$$N = 5.9 \cdot 10^{28}\text{m}^{-3}$$

$$f_{\text{rez}} = 1.15 \cdot 10^5 \text{ Mhz}$$

$$B = 0.7 \text{ T}$$

$$\tau = ?$$

Relaksacijsko vrijeme je, uz  $m^* = \frac{eB}{\omega_{\text{rez}}}$  efektivnu masu elektrona u zlatu :

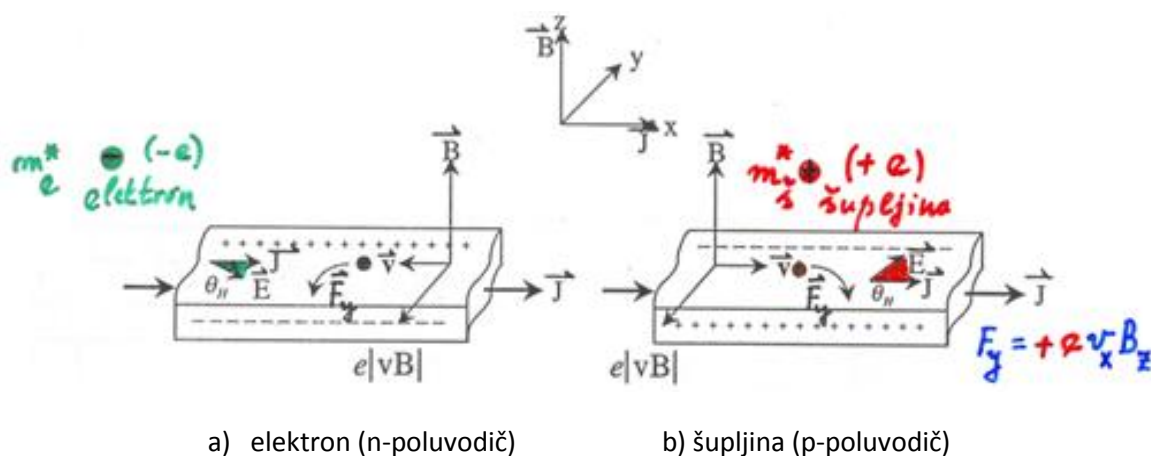
$$\tau = \frac{\delta \cdot m^*}{Ne^2} = \frac{\delta}{Ne^2} \cdot \frac{eB}{2\pi f}$$

$$\tau = \frac{4.37 \cdot 10^7 \cdot 0.7}{5.9 \cdot 10^{28} \cdot 1.6 \cdot 10^{-19} \cdot 2\pi \cdot 1.15 \cdot 10^{11}} = 4.487 \cdot 10^{-15} \text{ s}$$

## FENOMENOLOŠKA TEORIJA HALLOVOG EFEKTA

Kada na struju koja teče vodljivim ili poluvodičkim kretiteljima primijenimo okomito magnetsko polje, stvara se električno Hallovo polje koje je okomito i na struju i na magnetsko polje. To je poznati Hallov efekt (E.H. Hall pojavu je otkrio 1879.). Pojava je višestruko primjenjena u otkrićima električnih svojstava poluvodiča i metala i u preciznim mjerenjima u mjernoj i računalnoj tehnici. Protumačit ćemo i izvesti fenomenološke relacije Hallovog efekta, predpostavljajući da je duljina uzorka beskonačna i gustoća struje neovisna o djelujućem magnetskom polju, te da se otpor ne mijenja primjenom magnetskog polja (nema pojave magnetskog otpora "no magnetoresistance effect").

Osnovne fenomenološke definicije u Hallovom efektu (Hallovo polje, Hallov koeficijent, Hallov kut, faktor raspršaja Hallovog koeficijenta i Hallovu pokretljivost) izvest ćemo polazeći od slike 1 za Hallov efekt u poluvodičima. Uzimamo da gustoća struje  $\vec{J}$  jednoliko teče uzduž beskonačno dugog uzorka u smjeru osi x. Gustoća elektrona jest  $N$  ( $N \equiv N_e$ , gdje je  $N_e$  broj vodljivih elektrona u poluvodiču) pa gustoća struje iznosi  $\vec{J} = N(-e)\vec{v}$ , gdje je  $-e$  naboj elektrona a  $\vec{v}$  brzina pomaka elektrona. Brzinu elektrona  $\vec{v}$  zvat ćemo brzinom pomaka ili driftnom brzinom (drift velocity) jer se elektroni u poluvodiču kao i u metalima na gibaju kao slobodne čestice. U gibanju elektrona kroz periodičku rešetku pod djelovanjem električnog polja u x-smjeru elektroni trpe sudare ili raspršenja s fononima (kvanti titranja rešetke) i nečistoćama (nesavršenstvima) u rešetki. Između tih sudara/raspršenja unutar tzv. relaksacijskog vremena ( $\tau = \text{relaksacijsko vrijeme}$  ili  $\langle \tau \rangle$  prosječno relaksacijsko vrijeme), elektroni imaju usmjerenu brzinu u smjeru polja koja se često naziva kao tzv. srednja brzina  $\langle v_x \rangle$  ili brzina pomaka. U takvoj slici elektroni pridonose struji baš tzv. pomakom (driftom) u smjeru polja između spomenutih sudara.



**Slika1.** Hallov efekt u poluvodičima. Slika a: stvaranje Hallovog polja za elektrone, za n-tip poluvodiča i slika b: Hallovo polje za p-tip poluvodiča.

Dodatni razlog za pojavu brzine pomaka  $\vec{v}$  elektrona jest da na njih djeluje Lorentzova sila  $\vec{F} = -e\vec{v} \times \vec{B}$ . Budući da struja  $\vec{J}$  teče u +x smjeru, treba uočiti da je komponenta brzine  $v_x < 0$  tako da elektroni imaju pomak u -x smjeru (vidi sliku a; elektron negativno nabijena čestica i prisjetite se klasične definicije tehničkog smjera struje). Magnetsko polje  $\vec{B}$  djeluje u z smjeru pa će Lorentzova sila  $F_y = -e(|v_x|B_z) = -e|v_x|B_z < 0$  djelovati na elektronu u -y smjeru (slika a). Dakle, elektroni zbog Lorentzove sile skreću (gibaju se) u -y smjeru ! Naglašavamo da se Hallov efekt uobičajemo mjeri (definira) kao električno polje induciramo u y smjeru, bez ikakvog tijeka struje u tom smjeru. Negativni nosioci (elektroni) pomiču se (skreću) prema prednjoj strani uzorka (poluvodiča), a nepokretni pozitivni naboj (donori) prema stražnjoj površini, kao što je pokazano na slici 1a. Dakle, rezultirajuće ili inducirano električno polje jest Hallovo polje i djeluje u -y smjeru,  $E_y < 0$ . Hallovo polje ujednačuje Lorentzova sila i u stacionarnom slučaju vrijedi:

$$F_y + (-e)E_y = 0$$

Lorentzova sila

sila zbog Hallovog polja

Hallovo polje  $E_y$ , definiramo pomoću prethodnih relacija :

$$-e \cdot E_y = e \cdot v_x \cdot B_z \rightarrow E_y = v_x \cdot B_z = -\frac{B_z \cdot J_x}{Ne} = R_h \cdot B_h \cdot J_x \quad (1)$$

$$I_x = -e \cdot N \cdot v_x \rightarrow v_x = -\frac{J_x}{Ne}$$

U formuli (1) uključen je i definiran Hallov koeficijent  $R_h$  (često se naziva i konstanta):

$$R_h = -\frac{1}{Ne} \quad (2)$$

Uočimo da je  $R_h$  negativni koeficijent (konstanta). Uobičajeno je fenomenološko tumačenje da su struja  $J_x$ , magnetsko polje  $B_z$  i polje  $E_y$  međusobno okomiti i tvore desni koordinatni sustav ( $R_h = \frac{E_y}{B_z \cdot J_x}$ ).

Hallov kut  $\Theta_h$  jest kut između  $E_x$  i  $E_y$  :

$$\text{tg}\Theta_h = \frac{E_y}{E_x} \quad (3)$$

Koristeći relacije  $E_y = v_x \cdot B_z$  i  $v_x = -\mu_e \cdot E_x$ , gdje je  $\mu_e$  pokretljivost elektrona u poluvodiču, dobivamo:

$$tg\theta_h = \frac{E_y}{E_x} = \frac{v_x \cdot B_z}{E_x} = -\mu_e B_z \quad (4)$$

Da bismo uveli još jednu fenomenološku relaciju za Hallov kut, definirat ćemo i relaksacijsko vrijeme  $\tau$ , kao ono vrijeme usmjerenog života elektrona između njegovih sudara u gibanju rešetkom. Koristit ćemo 'ad hoc' Newtonov zakon gibanja za takvo gibanje u x-smjeru:

$$(F_t = mv): e \cdot E_x \cdot \tau = m^* \cdot (-v_x) \quad \tau = -\frac{m^* \cdot v_x}{e \cdot E_x} = \left| \mu_e = -\frac{v_x}{E_x} \right| = \frac{\mu_e \cdot m^*}{e} \quad (5)$$

Znajući još da ciklotronska kutna frekvencija  $\omega_c$  za elektrone u poluvodiču, koristeći njihovu skalarnu efektivnu masu  $m^*$ , iznosi :

$$\omega_c = \frac{eB_z}{m^*} \quad (6)$$

dobivamo koristan izraz za Hallov kut  $\theta_h$  :

$$tg\theta_h = -\mu_e B_z = \frac{v_x}{E_x} \cdot \frac{m^* \cdot \omega_c}{e} = \tau \cdot \omega_c \quad (7)$$

**Hallov efekt za šupljine u poluvodiču.** Sve fenomenološke definicije do sada izvedene su i odnose se na elektrone u n – poluvodiču. Na slici 1 b) predložen je Hallov efekt za šupljine u p – tipu poluvodiča. Struja šupljina teče u + x smjeru, a i njihova brzina pomaka ( $v_x > 0$ ) također u + x smjeru. Lorentzova sila  $F_y = +lv_x B_z$  djeluje na šupljine u –y smjeru (vidi sliku b). Šupljine, kao pozitivni nosioci, pomiču se prema prednjoj strani, a nepokretni (negativni) akceptori na y strani poluvodiča. Rezultirajuće Hallovo polje orijentirano je u +y smjeru, suprotno od situacije s elektronima u n – tipu poluvodiča.

**Hallov koeficijent**  $R_H$  za šupljine, koncentracije  $N_s$  u poluvodiču, iznosi:

$$R_H = \frac{1}{N_s l} \quad (8)$$

Uzmimo da je širina poluvodiča na slici 1. u y – smjeru d, a debljina u z – smjeru h: Hallov napon u y – smjeru bit će  $V_H = E_y d$ . Budući da je struja  $I_x = J_x dh$ , na osnovu relacije (1), Hallov efekt se može napisati kao:

$$V_H = E_y d = R_H B_z J_x d = R_H B_z J_x \frac{I_x}{J_x h} = \frac{R_H}{h} I_x B_z \quad (9)$$

Mjerenjem Hallovog efekta prema rel. (9) dobivamo Hallov koeficijent  $R_H$ , a na temelju toga gustoću elektrona (rel.2) i gustoću šupljina (rel.8) u poluvodičima.

Hallov koeficijenti za elektrone i šupljine (rel. 2 i 8) izvedeni su pod pretpostavkom da su xxxxxxxx vremena nosioca  $\tau$  neovisna o njihovoj energiji. Uzimajući u obzir da  $\tau$  ovisi o energiji nosioca i da efektivna masa  $m^*$  nije skalarna veličina ( aproksimacije efektivne mase zbog doprinosa donora ili akceptora u poluvodičima), Hallov koeficijent se, umjesto relacije (2) opisuje sljedećom relacijom:

$$R_H = -\frac{r_H}{N_l} \quad (10)$$

gdje je  $r_H$  = **faktor raspršenja Hallovog koeficijenta**. Osim u trivijalnom slučaju ( $r_H = 1$ ), vrlo je teško odrediti faktor raspršenja  $r_H$  u poluvodičima jer postoje različiti procesi raspršenja elektrona i šupljina koje prethodno valja poznavati teorijski ili eksperimentalno. Brzine pomaka nosioca nisu više jednake zbog raspršenja, a i efektivne mase nisu izotropne u vodljivoj ili valentnoj vrpici. Za opise takvih pojava, uvedena je i veličina **Hallova pokretljivost**  $\mu_H$ , koja se definira pomoću koeficijenta vodljivosti  $\sigma$  i Hallova koeficijenta:

$$|R_H| \sigma = \mu_H \quad (11)$$

Hallova pokretljivost dimenzijski se podudara s pokretljivošću nosioca  $\mu$ , tako da vrijedi relacija:

$$\frac{\mu_H}{\mu} = r_H \quad (12)$$

**Fenomenološka teorija Hallovog efekta** za poluvodiče, izvedena do sada, doista je izgrađena na jednostavnom modelu. Unatoč tome rezultati su dobri, napose za objašnjenje glavnih karakteristika Hallovog efekta. Naravno da postoje brojni neskladi između fenomenološke teorije i eksperimentalnih opažanja, napose u pogledu zanimljivih i kvantnih magnetskih pojava i učinaka u poluvodičima, čime se bave savršenije teorije.

Još na kraju ovog fenomenološkog pristupa, navodimo dvije korisne relacije za Hallove koeficijente za poluvodiče, za primjene u dva ekstremna slučaja. Prvi je relacija za Hallov koeficijent za crlo niska magnetska polja  $R_H(0)$ , a drugi koeficijent za vrlo visoka magnetska polja  $R_H(\infty)$ :

$$R_H(0) = \frac{N_s \mu_s^2 - N \mu_e^2}{e(N_s \mu_s + N \mu_e)^2} = \frac{N_s - b^2 N}{e(Nb + N_s)^2} \quad \text{i} \quad R_H(\infty) = \frac{1}{e(N_s - N)} \quad (13)$$

gdje je  $b = \frac{\mu_e}{\mu_s}$  omjer pokretljivosti nosioca. Treba naglasiti da ove formule vrijede samo pod uvjetom da je faktor raspršenja  $r_H = 1$ , te da su relaksacijska vremenska konstanta (neovisna o energiji nosioca).

## KVANTNI HALLOV EFEKT

Kvantni Hallov efekt otkrio je 1980. Klaus von Klitzing s dvojivom suradnika. Otkriće je značajno utjecalo na fiziku poluvodiča, a ponajviše tako što je kvantni Hallov efekt doveo do rezultata da je na temelju tog efekta usvojen Hallov otpor za međunarodni standard otpora. Kvantni Hallov efekt opažen je u dvodimenzionalnom elektronskom plinu u Si – MOSFET strukturi. Elektronski plin je nastao u inverznom sloju pomoćnapona odvoda i magnetskog polja odvoda (drain). Uređaj sa Si – MOSFETom je radio na temperaturi  $T=1,5K$ , u magnetskom polju  $B=18T$ , sa strujom izvor – odvod od  $I = 1\mu A$ . Koju novu pojavu su von Klitzing i suradnici otkrili u njihovu eksperimentu?

U klasičnoj teoriji tzv. Hallova vodljivost  $\sigma_{xy}$  u x,y – ravnini, na koju djeluje magnetsko polje B u z – smjeru, proporcionalno je inverznoj gustoći elektrona  $N_s$  (misli se na broj elektrona u inverznom sloju poluvodičke strukture). Veličina  $N_s$  tipično se odnosi na gustoću elektrona u zadanoj ravnini (površini), a donji indeks  $s$  dolazi od engleskog naziva "sheet electron density". Inverzna gustoća elektrona  $N_s$  se mijenja (upravlja) naponom odvoda. Dakle, Hallov napon je proporcionalan Hallovu otporu odnosno inverznoj elektronskoj gustoći:

$$\sigma_{xy} \propto N_s ; V_H \propto R_H \text{ i } V_H \propto \sigma_{xy} \quad (14)$$

Eksperimenti von Klitzinga i suradnika na Si-MOSFETu pokazao je da Hallov napon nije proporcionalan inverznoj elektronskoj gustoći  $N_s$ . Naime, Hallov napon pokazao je plateau u određenim područjima elektronske gustoće u promatranoj ravnini. Hallov napon pokazao je plateau u područjima koje pokazuje napon  $V_{pp}$  (razlika potencijala između dvije probne točke u eksperimentu) kad prolazi kroz minimum u svojim oscilacijama.

Na temelju rezultata pokusa, Hallov otpor  $R_H$  definiran pomoću Hallovog napona podijeljenog strujom izvor – odvod u Si-MOSFETu iznosi:

$$R_H = \frac{\text{Hallovnapon}}{\text{strujaiizvor} - \text{odvod}} = \frac{h}{e^2} * \frac{1}{i} = \frac{25813}{i} \Omega \quad (15)$$

gdje je  $i=1,2,3,\dots$ . Vidimo da je Hallov otpor  $R_H$  kvantiziran! Ovdje definirani Hallov otpor  $R_H$  strogo treba razlikovati od fenomenološkog Hallovog koeficijenta  $R_H$  (rel. 2 i 8.)

Kvantni Hallov otpor mjerio se i umjeravao u brojnim laboratorijima u svijetu nakon von Klitzinga. Dobiveni podaci se slažu unutar točnosti 0,1ppm pa je kvantni Hallov otpor prihvaćen kao međunarodni standard otpora:

$$R_K = 25812,807\Omega \quad (16)$$

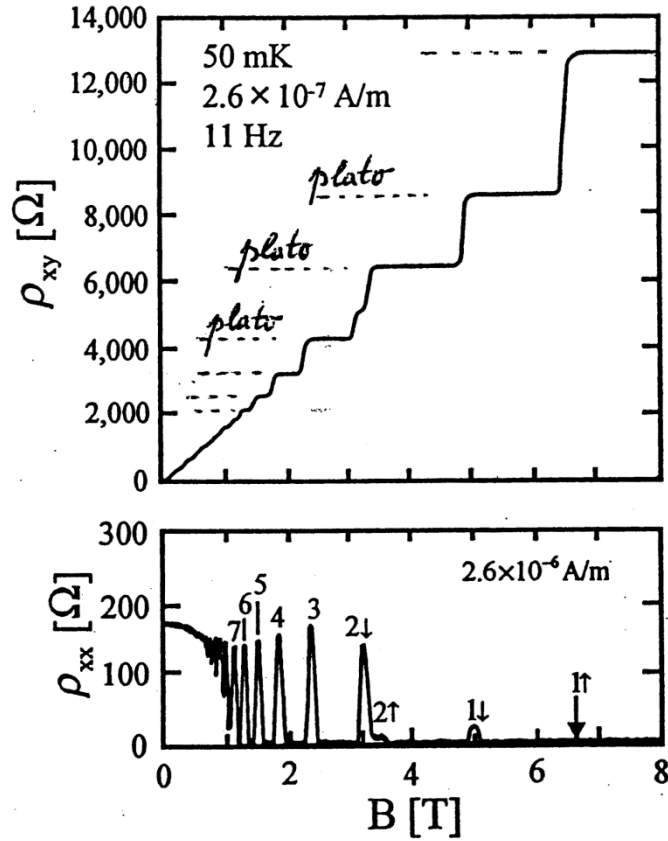
Indeks K stoji zbog von Klitzingova doprinosa, a  $R_K$  se naziva von Klitzingova konstanta.

Ipak su nakon von Klitzingova otkrića eksperimentalno opažene anomalije u Hallovu otporu i magnetskom otporu, tako da postpje i razlomljene vrijednosti od i pored onih cjelobrojnih. U vezi s tim postoji "cjelobrojni kvantni Hallov efekt" (IQHE = Integer Quantum Hall Effect) , nasuprot kasnije otkrivenih pojava (gdje je i razlomljen) koje se nazivaju "razlomljeni kvantni Hallov efekt" (FQHE = Fractional Quantum Hall Effect).

Za izravni uvid u plateau u kvantnom Hallovu efektu pomaže nam slika 2. koja pokazuje jasne plateau u složenoj (heterogenoj) poluvodičkoj strukturi AlGaAs/GaAs. Slika pokazuje potpuni kvantni Hallov efekt u dvodimenzionalnom elektronskom plinu, s izraženim Landanovim elektronskim stanjima (Landan levels) u uzorku pod jakim magnetskim poljem. Ovaj kvantni efekt nije moguće protumačiti u okviru klasične teorije, već su potrebne kvantnomehaničke metode (npr. metoda matične gustoće. Kubova formula – prema njezinome autoru R. Kubo, i druge).

Za poimanje i objašnjenje temeljnih eksperimenata i rezultata o kvantnome Hallovu efektu, temeljno je razumijevanje vladanja Fermijeve energije u poluvodičima i svojstva Landanovih stanja u poluvodičima pod djelovanjem jakih magnetnih polja. Fizikalnu sliku i postanak Landanovih stanja u





Slika 2. Kvantni Hallov efekt u heterogenoj poluvodičkoj strukturi AlGaAs/GaAs. Uslijed visoke pokretljivosti u dvodimenzionalnom elektronskome plinu u ovoj strukturi, očividni su izraziti platoi u Hallovoj vodljivosti  $\sigma_{xy}$  ( $\rho_{xy} \propto \sigma_{xy}^{-1}$ ). Na donjoj slici je prikazana magnetovodljivost  $\sigma_{xy}$  ( $\rho_{xy} \propto \sigma_{xy}^{-1}$ ) uzorka u ovisnosti o magnetskoj indukciji B. Indeksi (brojevi i strelice) odnose se na Landanov kvantni broj i polarizaciju spina. Podaci su dobiveni na temperaturi  $T=50\text{mK}$  i struji  $I = 2,6\mu\text{A}$ .

elektronskome plinu, detaljno ćemo obraditi u DODATKU ovome odjeljku. Kad magnetsko polje djeluje na poluvodič, Ferminijeva energija (nivo)  $E_F$  prolazi dnom Landanovih stanja:

$$E_F = \frac{h^2}{2m^*} (3\Pi^2 N)^{\frac{2}{3}} \quad (17)$$

gdje je N gustoća elektrona u poluvodiču, koji je pri graničnoj temperaturi  $T = 0\text{K}$ , a ispunjen je i uvjet degeneracije za spinove. Naime, gustoća stanja odnosno elektrona N je u formuli (17) uračunata/umnožena jednostavno faktorom 2 zbog dvije orijentacije spinova. Dakle, Ferminijeva energija je smještena pri dnu jednog od Landanovih stanja, dok magnetsko polje djeluje na poluvodič. Gustoća stanja je tu najveća jer je broj raspršenja za elektrone baš najveći na tome mjestu jer ima

najviše končnih stanja za raspršene elektrone. Pod magnetskim poljem u kojemu se Ferminijeva energija u poluvodiču ne mijenja, navedeni uvjeti nam omogućuju sljedeću relaciju:

$$E_F = \hbar \omega_c \left(N + \frac{1}{2}\right) = \hbar \frac{eB}{m^*} \left(N + \frac{1}{2}\right), \quad N=0,1,2,3,\dots \quad (18)$$

U poluvodiču se stvara magnetski otpor koji periodički oscilira obrnuto razmjerno primjenjenom magnetskom polju  $\frac{1}{B}$ . Period oscilacija iznosi:

$$\Delta\left(\frac{1}{B}\right) = \frac{eh}{m^* E_F} = \frac{2e}{h} (3\pi^2 N)^{-\frac{2}{3}} \quad (19)$$

Ova pojava poznata je kao Shubnik – de Haasov efekt.

Orijentirajmo se na dvodimenzionalni elektronski plin površinske gustoće stanja  $N_s$  u promatranoj ravnini, za koju vrijedi ciklotronska kutna frekvencija  $\omega_c = \frac{eB}{m^*}$  u gibanju elektrona u toj ravnini. Vodljivost  $\sigma_{xy}$  u toj ravnini u magnetskom polju iznosi:

$$\sigma_{xy} = -\frac{N_s e}{B} + \frac{\sigma_{xx}}{\omega_c \tau} \quad (20)$$

Budući da je zadovoljen uvjet  $\omega_c \tau \gg 1$  za dobro definiranu rezonanciju ( $\tau$  = relaksacijsko vrijeme ili vrijeme između raspršenja), relacija (20) se pojednostavljuje u :

$$\sigma_{xy} = -\frac{N_s e}{B} \quad (21)$$

Gustoća elektronskih stanja u dvodimenzionalnom elektronskom sustavu zadana je konstantnom vrijednošću  $\frac{m^*}{2\pi\hbar^2}$  (vidi u DODATKU za Landanova stanja). Potrebno je odrediti gustoću stanja za svako Landanovo stanje (razinu) u tome sustavu, polazeći od ciklotronskog polumjera  $r$  osnovnog Landanovog stanja:

$$r = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}} \quad \Rightarrow \quad \frac{1}{2\pi r^2} = \frac{eB}{2\pi\hbar} = \frac{eB}{h} \quad (22)$$

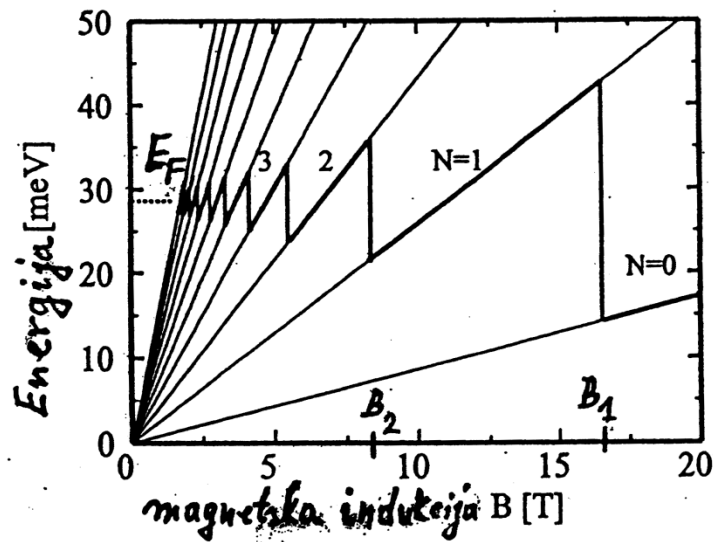
Landanova stanja su degenerirana/umnožena zbog spina jer je u gustoći stanja njihov broj pomnožen faktorom 2 zbog dviju spinskih orijentacija. Mi ćemo u komentarima slika i znanstvenih podataka zanemariti degeneraciju te uzimati u obzir samo jednu od dviju orijentacija spina. Zanimat ćemo i

proširenja gustoće stanja pretpostavljajući da se mogu predočiti **delta funkcijom**. Pod spomenutim uvjetima, Landanova stanja na Ferminijevoj energiji dok djeluje magnetsko polje, jednostavno glase:

$$E_N = n + \frac{1}{2} \quad (23)$$

Ova interesantna i jednostavna situacija prikazana je na slici 3. , za dvodimenzionalni elektronski plin efektivne mase  $m^* = 0,67m$  i stalne površinske gustoće elektrona  $N_s = 4,0 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ . Najniže magnetsko polje pri kojemu elektroni zauzimaju najniže Landanovo stanje  $N=0$ , daje vrijednost polja  $B_1$  :

$$\frac{eB_1}{h} = N_s \Rightarrow B_1 = \frac{N_s h}{e} \quad \text{i} \quad B_1 = 16,6T \quad (24)$$



Slika 3. Zaposjednutost Landanovih stanja na Ferminijevoj energiji u ovisnosti o magnetskome polju B, za dvodimenzionalni elektronski plin efektivne mase  $m^* = 0,67m$ . Ferminijeva energija oscilira u ovisnosti o magnetskoj indukciji B, a Landanova stanja se zaposjedaju sve manje opadanjem indukcije. Doprinos spina (faktor 2) nije uzet u obzir na slici.

Na slici 3. vidimo da u magnetskom polju manjem od  $B_1$ , Landanovo osnovno (prvo) stanje  $N=0$  ne može obuhvatiti sve elektrone, tako da oni zaposjedaju drugo ( $N=1$ ) Landanovo stanje. Za ovo stanje, magnetsko polje se snizuje do  $B_1 = \frac{B_1}{2} = 8,4T$ . Elektroni počinju popunjavati treće ( $N=2$ ) stanje i tako redom. Ferminijeva energija na  $T=0K$  na slici 3. je prefožena debljom crtom. Gustoća stanja za

prikazivanje podataka uzeta je delta funkcijom za plinsku (zračnu) gustoću stanja  $\frac{2eB}{h}$ . Vidimo da Ferminijeva energija oscilira s magnetskim poljem. Oscilatorno vladanje Ferminijeve energije očituje se i u Shubnikov – de Haasovim oscilacijama u vodljivosti  $\sigma_{xx}$ . Na temelju slike 3. vidimo da dok elektroni popunjavaju više i-to Landanovo stanje ( $i=N+1$ ), vrijedi prema rel. (24) mjeriteljska relacija:

$$N_s = i \frac{eB}{h} \quad (25)$$

Vodljivost  $\sigma_{xy}$ , prema rel, (21) postaje:

$$\sigma_{xy} = -\frac{N_s e}{B} = -i \frac{e^2}{h} \quad (26)$$

tako da dobivamo kvantni Hallov otpor identičan rel (15) u von Klitzingovu eksperimentu:

$$R_H = \frac{1}{i} \frac{h}{e^2} = \frac{25813}{i} \Omega \quad (27)$$

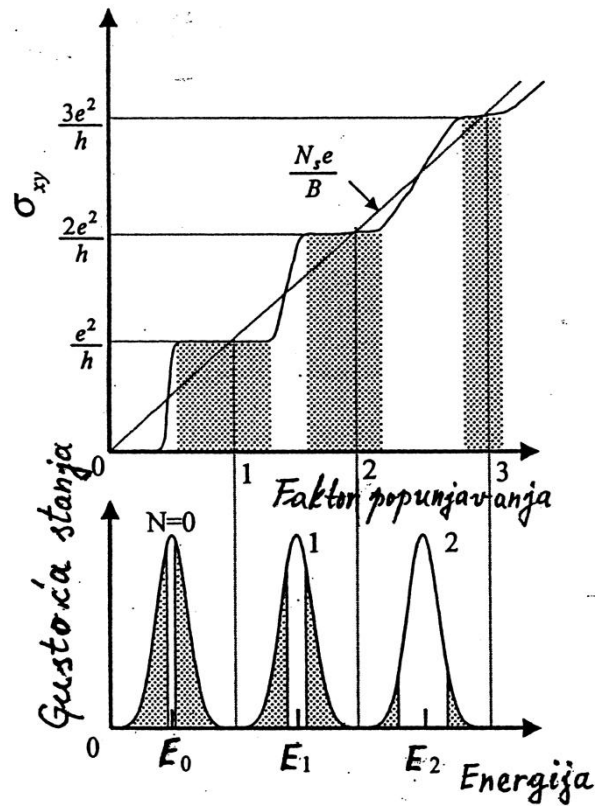
Ovdje imamo kvantnu spoznaju više (jasnije) od one prethodne u von Klitzingovu opažanju: vrijednost Hallovog otpora je kvantizirana i da u Hallovu naponu postoje platoi. Sada znamo da je  $R_H$  kvantiziran samo u točkama gdje se broj zaposjedutih Landanovih stanja i mijenja. Međutim, ova spoznaja ne objašnjava platoe u Hallovu otporu u odabranim područjima magnetskog polja.

Iz relacije (25), stavimo li  $i=1$ . dobivamo  $\frac{B}{N_s} = \frac{e}{h}$  tako da jedan magnetski tok prolazi kroz

Landanovu stazu za elektron, Općeniti, i kvantna toka protječu kroz Landanovu stazu za i-to kvantno Hallovo stanje. Fundamentalna spoznaja glasi: kvantna Hallova stanja su povezana (pridružena) s kvantizacijom magnetskog toka. Međutim, platoi se niti u svjetlu ove spoznaje ne mogu objasniti!

U eksperimentima se platoi u dvodimenzionalnom elektronskom plinu opažaju u području koja na kraju (rubu) magnetskog polja odnosno Landanovih staza. U središtima Landanovih staza. Odnosno u sredini poluvodičkog uzorka, elektroni imaju potpune ciklotronske staze i pridonose struji. Budući da Landanova stanja imaju konačnu duljinu, elektronska stanja su na rubu Landanovih stanja lokalizirana pa elektroni u takvim stanjima ne pridonose struji. Ovo svojstvo je protumačeno na slici 4. Kada je Ferminijevo stanje smješteno unutar osjenčanog područja (lokalizirano stanje), elektroni ne pridonose struji i stvaraju se platoi. Imamo sljedeće relacije:

$$\sigma_{xx} = 0 \quad i \quad \sigma_{xy} = \frac{N_s e}{B} = i \frac{e^2}{h} \quad (\text{Hallov plato u } \sigma_{xy}) \quad (28)$$



Slika 4. Podrijetlo/postanak platoa u kvantnom Hallovu efektu. Popunjavanje elektronima predloženo je površinskom (dvodimenzionalnom) gustoćom stanja koja se mijenja pod stalnim magnetskom poljem. U prisutnosti tzv. Lokalnih Landanovih stanja, elektroni koji zauzimaju lokalna stanja ne mogu pridonijeti struji stvarajući kvantna Hallova stanja (platoi). Pojava stvaranja platoa ovisi o faktoru popunjavanja elektronima u tim stanjima.

Kad je Fermijevo stanje u nelokalnim stanjima (središtu ciklotronskih staza ili središtu uzorka), Hallova vodljivost  $\sigma_{xy} = \frac{N_s e}{B} = i \frac{e^2}{h}$  se povećava s gustoćom elektrona (vidi sliku). Povećanjem gustoće (broja) elektrona, sljedeće više Landanovo stanje se popunjava i zauzima elektronima: tada se stvara kvantna Hallova vodljivost  $\sigma_{xy} = (i + 1) \frac{e^2}{h}$  stvarajući odgovarajući plato.

Zanimljive pojave povezane s Hallovim kvantnom efektom, s oštrom teorijskim tumačenjima i možebitnim korisnim primjenama, događaju se i u našim danima. Spomenut ćemo, na kraju ovog odjeljka, interesantnu pojavu "rubnog kanala" u kvantnom Hallovu efektu na površinama poluvodiča u vrlo jakom magnetskom polju. Landanova stanja oko središta uzorka su predložena potpunim ciklotronskim stazama i tavnom energijom stanja, a u blizini rubova umjesto ciklotronskog elektroni imaju poskakujuća gibanja ("skipping motions"). Landanova stanja u blizini rubova se jako svijaju uvis

zbog potencijalnih zidova na rubovima. Goorimo o rubnome kanalu ("edge channel") u poluvodiču, a opažena struja u njemu rubnom strujom ("edge current") što nastaje zbog poskakivanja elektrona u tome kanalu.

## DODATAK (za kvantni Hallov efekt)

### Gibanje elektrona u magnetskom polju. Landanova stanja (Landan levels)

Opisujemo gibanje elektrona u elektronskome plinu u metalu ili poluvodiču. Pod djelovanjem magnetskog polja  $\vec{B}$  na elektronski plin. Elektroni se gibaju kroz kristalnu rešetku količinom gibanja  $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ , u vodljivoj vrpici sa sfernom površinom konstantne energije i paraboličnom energijskom ovisnošću o vrpici:  $E_0(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$ , gdje je  $m^*$  efektivna skalarna mas elektrona. Pod djelovanjem magnetskog polja indukcije  $\vec{B}$ , Lorentzova sila prisiljava elektrone na kružno gibanje spiralnom stazom oko smjera  $\vec{B}$ . Postavimo da je polje  $\vec{B}$  usmjereno u z smjeru ( $B = B_z$ ), pa će se elektron kružno gibati u x,y ravnini u duhu tizičkog modela ciklotronskog gibanja. Primjenit ćemo najjednostavniju kvantnomehaničku sliku (relacije) na kružnu stazu elektrona!

Najprije, za gibanje elektrona u xy-ravnini vrijedi uvjet ravnoteže i Lorentzove sile:

$$m^* \frac{v^2}{r} = evB_z \quad \text{i} \quad m^* v = p = erB_z \quad (29)$$

Kružnu sliku elektrona ( $2\pi r$ ) kvantiziramo tako da na nju smještamo cijeli broj valnih duljina de Broglievog elektronskog vala ( prisjetite se Bohrovog modela atoma):

$$2\pi r = n\lambda = n \frac{h}{p} \quad \text{i} \quad rp = n \frac{h}{2\pi} = nh \Rightarrow p = \frac{nh}{r} = \frac{nh}{2\pi r} \quad (30)$$

Povezivanjem (29) i (30) dobivamo:

$$\frac{nh}{r} = erB_z \quad \text{i} \quad r^2 \pi B_z = n \frac{h}{2e} = n\Phi_0 \quad (31)$$

Dobili smo zanimljive rezultate: kroz kružnu stazu u ravnini, odnosno na plaštu valjka po kojemu se elektron spiralno giba, prelazi kvantizirani magnetski tok kao cjelobrojni višekratnik elementarnog toka ili fluksova  $\Phi_0 = \frac{h}{2e} = 2,06785 \times 10^{-15} \text{ JsC}^{-1}$  (ili Vs=Wb). Fluksove smo već objasnili u tumačenju kvantnih Hallovih platoa, a napose se opažaju u supravodičkoj fizici: oni se mjere u vrlo osjetljivim magnetskim mjerenjima (**magnetometri** ili **SQUID** – pojačala).

Možemo izračunati i valnomehaničku količinu gibanja  $p$ , pomoću relacija (29) i (30):

$$p = erB_z = e \frac{nh}{p} B_z \quad (r = \frac{nh}{p}) \Rightarrow p^2 = nheB_z \quad (32)$$

Na temelju toga, možemo, izračunati kinetičku energiju elektrona  $E_k = \frac{p^2}{2m^*}$  u ciklotronskome gibanju elektrona, znajući da ciklotronska kutna frekvencija iznosi  $\omega_c = \frac{eB_z}{m^*}$ . Dakle, iz relacije (32) dobivamo:

$$E_k = \frac{p^2}{2m^*} = \frac{1}{2} nh \frac{eB_z}{m^*} = \frac{1}{2} nh\omega_c \quad (33)$$

Ovaj pokazani račun je najjednostavniji pristup što daje najnižu energiju kružnih (ciklotronskih) staza elektrona u magnetskom polju.

Točna rješenja energijskih stanja daju **Landanova energijska stanja ( Landan levels)**. Prije točnog zapisa Landanovih kvantnih stanja, definirat ćemo još iz relacije (31) polumjer  $r$  ciklotronskog osnovnog stanja koje je neovisno o efektivnoj masi  $m^*$  elektrona:

$$n=1 \Rightarrow r^2 \Pi B_z = 1 \frac{h}{2e} \quad , \quad r^2 = \frac{h}{2\Pi eB_z} \quad \text{ili} \quad r = \sqrt{\frac{h}{eB_z}} \quad (34)$$

Izvod Landanovih energijskih stanja za "Blochov" elektron u kristalnoj rešetki u magnetskom polju  $\vec{B}$  primjenjenom u z-smjeru, počiva na zapisu hamiltonijeva elektrona u polju  $\vec{B}$  s magnetskim vektorskim potencijalom  $\vec{A}$  sa svojstvima  $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$  i  $\nabla \cdot \vec{A} = 0$ , te strogoj primjeni kvantne mehanike u izvođenju jednadžbe s odgovarajućim, koordinatama i veličinama u ciklotronskome gibanju. Poduljim izvođenjem, dopijeva se do jednadžbe jednodimenzionalnog harmoničnog gibanja s kutnom frekvencijom  $\omega_c$ , čija ćemo svojstvena rješenja za Landanova stanja eksplicitno napisati:

$$|N, X, p_z\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^N N! \sqrt{\Pi} r}} e^{-\frac{|X-X|^2}{2r^2}} e^{i(\frac{p_z Z}{h} - \frac{X_y}{r^2})} H_N\left(\frac{x-X}{r}\right) \quad (35)$$

Gdje su:

$N$  = kvantni broj svojstvenog Landanovog stanja,  $N=0,1,2,3,\dots$

$r = \sqrt{\frac{h}{eB_z}}$  = ciklotronski polumjer osnovnog Landanovog stanja



$X$ = koordinata središta ciklotronskog gibanja u paru  $(X,Y)$  koordinata na magnetsko polje  $\vec{B}$ . One su koordinate središta (centra) ciklotronskog gibanja. Izvod jednačbe gibanja u literaturi tipično počiva na relativnim koordinatama  $\xi = x - X$  i  $\eta = y - Y$  u gibanju elektrona.

$H_N$  = Hermitovi polinomi

Energija ciklotronskog gibanja elektrona (elektronskog plina) jest svojstvena kvantizirana energija koja pripada svojstvenim Landanovim stanjima:

$$E_N = (N + \frac{1}{2})\hbar\omega_c + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} \quad (36)$$

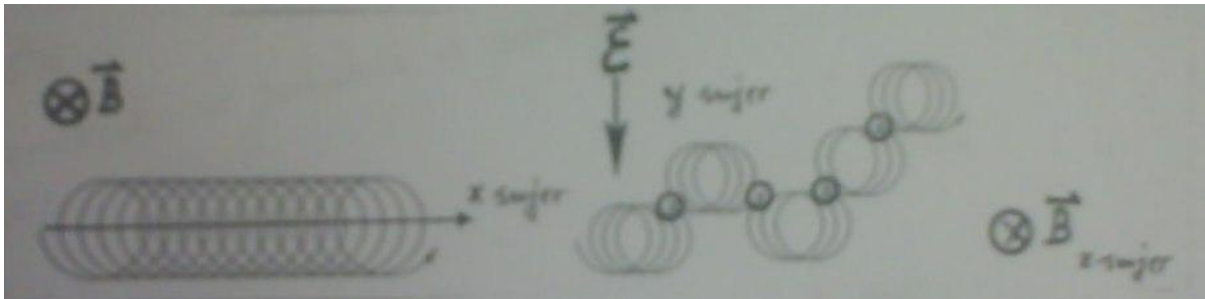
Drugi član u ovoj formuli za kinetičku energiju opisuje translacijsko gibanje (pomak) u smjeru osi  $z$  ( u smjeru polja  $B_z$  ).

Funkcija gustoće elektronskih Landanovih stanja  $g(E, B_z)$  po jedinici volumena u energijskom diferencijalnom razmaku  $E$  i  $E+dE$ , glasi:

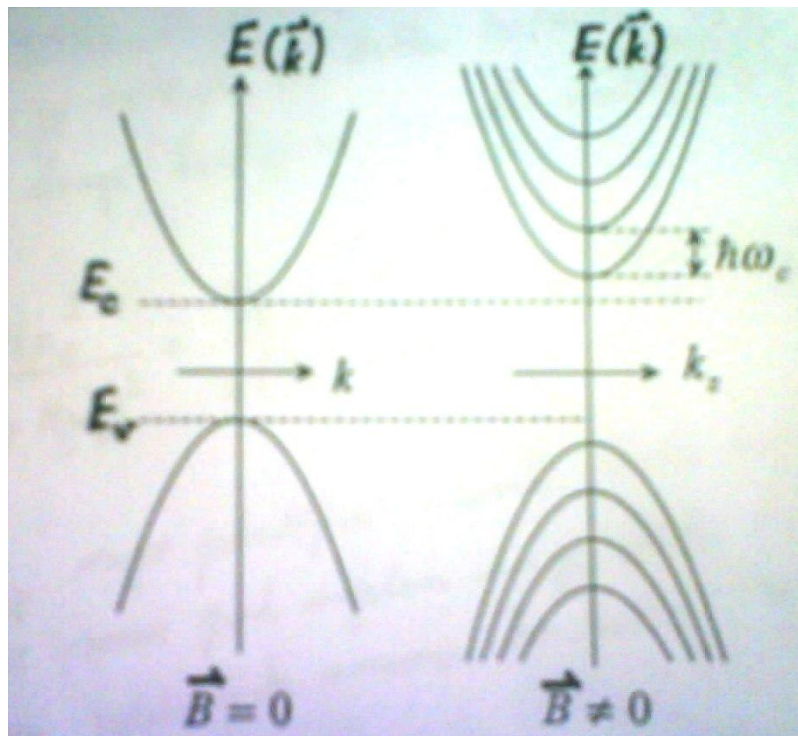
$$g(E, B_z) = \frac{eB_z \sqrt{2m^*}}{(2\pi\hbar)^2} \sum_n \frac{1}{\sqrt{E - (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_c}} \quad (37)$$

Gdje  $n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$  kvantizira stanja u  $z$  smjeru  $k_z = (\frac{2\pi}{L_z})n$ , gdje je  $L_z$  duljina uzorka promatrana u tome smjeru.

Pokazat ćemo dvije zanimljive slike o gibanju elektrona u magnetskom polju: fenomenološku o gibanju u stalnom magnetskom polju ( i električnom, radi potpune slike) te kvantna Landanova stanja u energijskim vrpčama:



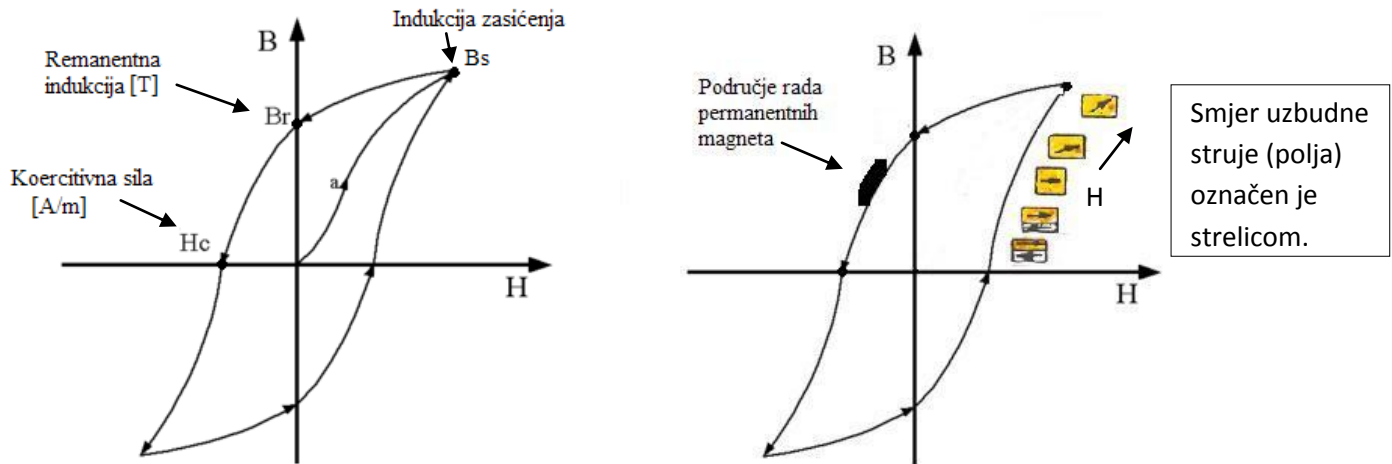
Slika 5. Gibanje elektrona u magnetskom polju  $\vec{B}$ , usmjerenom u z smjeru (okomito na stranicu teksta), i u jednolikom električnom polju  $\vec{E}$  primjenjenom paralelno stranici teksta. Na slici lijevo: kad nema raspršenja, elektron se kružno (ciklotronski) giba i spiralno napreduje u smjeru okomitom i na  $\vec{B}$  i na  $\vec{E}$ . U prisutnosti raspršenja, središte ciklotronskog gibanja se raspršuje te ima pomak ("a drift component") u smjeru električnog polja  $\vec{E}$  (na slici desno).



Slika 6. Kvantna elektronska stanja u magnetskom polju, za jednodimenzionalni slučaj. Na lijevoj polovici slike su energijske (parabolične) vrpce, ali bez magnetskog polja. Na desnoj slici su Landanova stanja u ravnini okomitoj na magnetsko polje.

## Feromagnetizam. Krivulja (petlja) histereze.

- Proces magnetiziranja feromagnetskih materijala nije reverzibilan: CIKLUS MAGNETIZIRANJA se opisuje (predočava) krivuljom histereze
- Energijski gubici tijekom ciklusa,  $\oint B \cdot dH \equiv \text{površini zatvorenoj krivuljom histereze}$

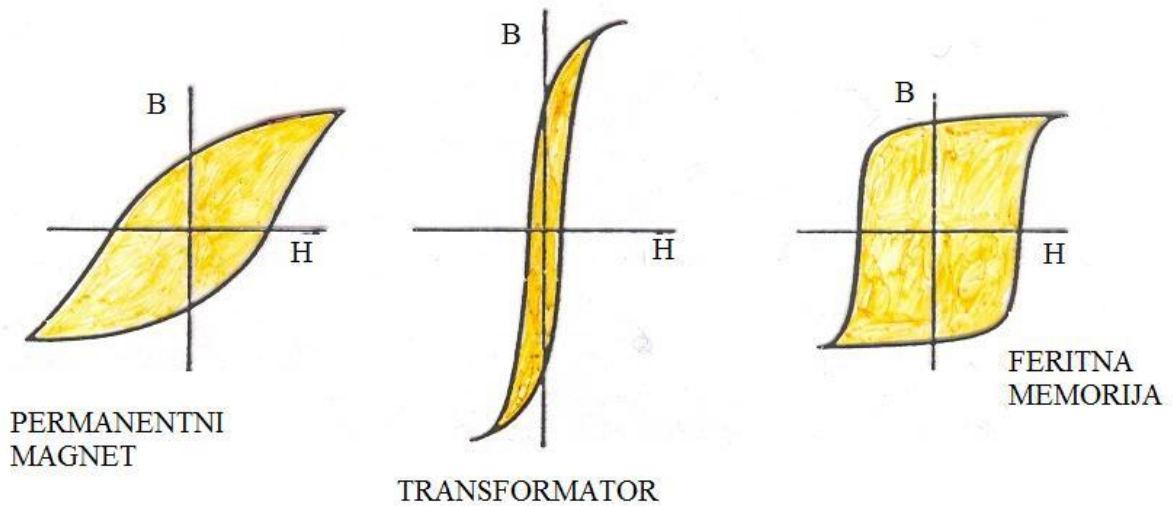


## Fenomenološki opis procesa tijekom petlje histereze.

Razlikujemo 3 procesa:

1. Primjenjeno vanjsko polje, na malim jakostima, pokreće Blochove zidove između onih domena koje su već gotovo magnetizirane u smjeru polja izazivajući njihov rast, na uštrb onih domena koje nisu tako (prikladno) orijentirane.  
Ovakvi pomaci zidova su reverzibilni za slabe jakosti polja
2. Daljnim porastom polja  $H$ , Blochovi zidovi se prebacuju preko potencijalnih prepreka (primjese, nesavršenosti u rešetki, ...) tako da se više ne mogu vratiti u izvorni položaj kad se  $H$  smanji.  
To je ireverzibilan proces.
3. Sve domene, magnetizirane u „krivom“ smjeru, mogu eventualno biti uklonjene, odnosno daljnjim povećanjem polja se magnetizacija domena iz njihova mekog (lakog) smjera preorijentira u smjer paralelan vanjskom polju.

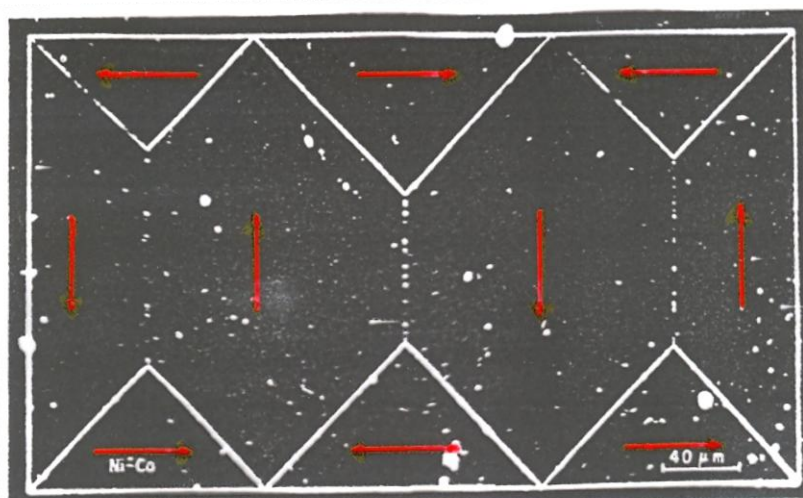
## Tipovi histereze za razne primjene



## Feromagnetske domene

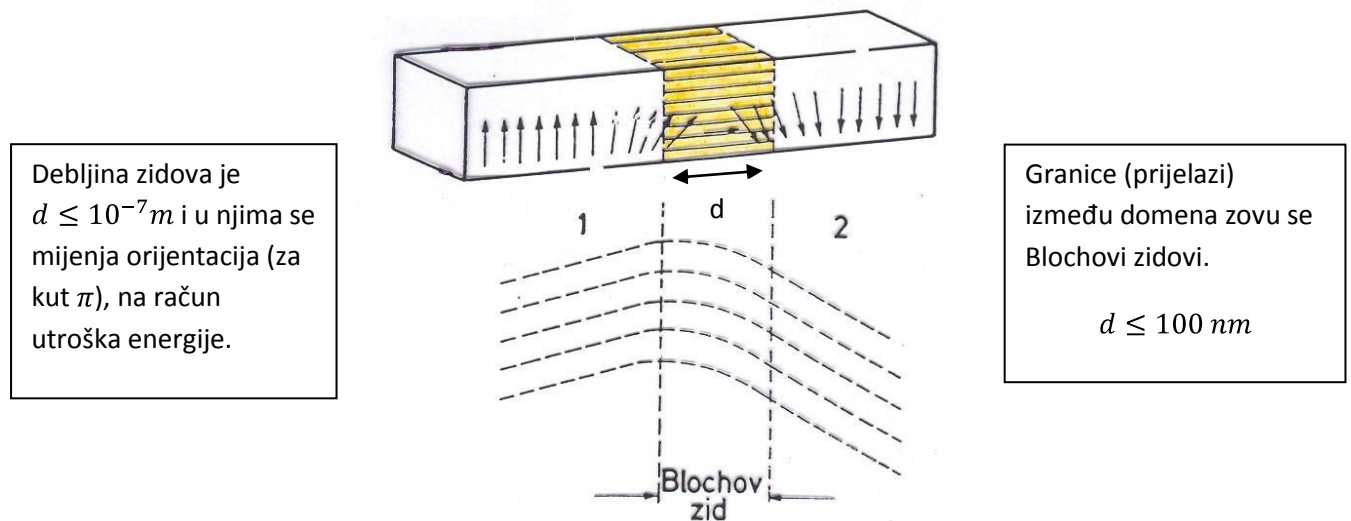
- Ispod  $T_c$  u materijalima postoje (Weissove) domene karakterizirane spontanom magnetizacijama.

Domene su područja veličine  $10^{-3}$  do  $10^{-4}$  m s oko  $\approx (10^{16}$  do  $10^{19})$  dipola u njima.



Feromagnetske domene u Ni – Co pločici (duljina uzorka je  $\sim 0,5$  mm). Vide se zaključane ili rubne domene u obliku trokuta.

- Ako je materijal magnetiziran u jednom smjeru (jedna domena): u polju oko uzorka spremljena je značajna magnetska energija,  $W = \frac{1}{2} \vec{H} \cdot \vec{B}$  po jedinici volumena
- Ako su dvije domene suprotnih magnetizacija u materijalu: energija je značajno smanjena.
- Zaključne domene („closure domains“) smanjuju energiju polja jer se smanjuje istjecanje silnica s rubova uzorka
- 



- Na vrlo niskim temperaturama ( $T \ll T_c$ ), magnetizacija feromagneta se mijenja po zakonu (koji ne slijedi iz Weisssove teorije):

$$M = M_0 \cdot (1 - \alpha T^{\frac{3}{2}}),$$

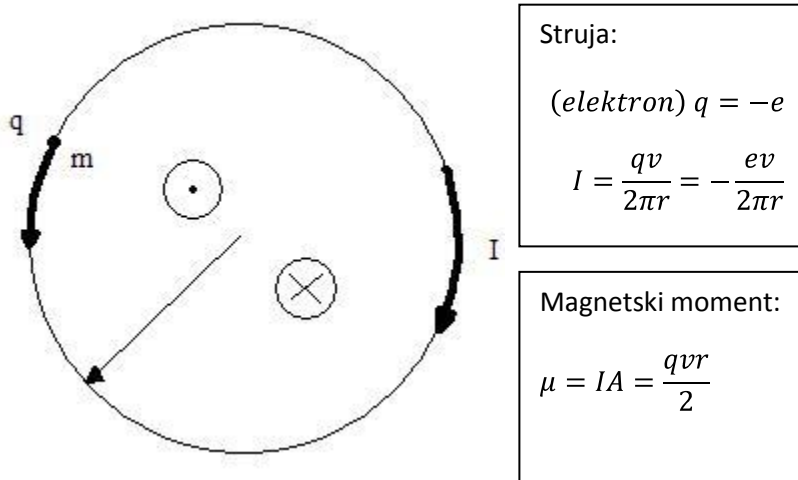
$M_0$  – magnetizacija na 0 K,

$\alpha$  - prilagodbeni (poravnavajuća konstanta).

Fizikalno objašnjenje polazi od spinskih orijentacija koje nisu statičke. Promjena usmjerenosti spinova opisuje se spinskim valovima koji su superpozicija svih pojedinačnih odstupanja u spinskoj orijentaciji od iona do iona.

## Magnetski moment klasične nabijene čestice

Pogledajmo klasičnu nabijenu česticu koja se giba po kružnoj stazi, te kako ona daje klasični kutni moment količine gibanja  $\vec{L}$  i stvara magnetsko polje opisano magnetskim momentom. Klasična čestica naboja  $q$ , giba se po kružnici polumjera  $r$  jednolikom brzinom  $v$  (vidi sliku):



Nabijena čestica  $q$  u vrtnji stvara struju:

$$I = qf = \frac{qv}{2\pi r}$$

Struja  $I$  u klasičnoj slici daje magnetski moment zatvorene stujne petelje. Magnetski moment  $\vec{\mu}$  iznosi:

$$\mu = IA = \frac{qvr}{2\pi r} \pi r = \frac{qvr}{2}$$

Budući da je klasični kvantni moment količine gibanja  $L = mvr$ , moguće ga je povezati s magnetskim momentom  $\mu$  nabijene čestice u kružnoj stazi:

$$\mu = \frac{q}{2m} L$$

Za elektron je  $q = -e$ , pa dobivamo klasičnu relaciju:

$$\mu = -\frac{e}{2m_e} L$$

Uvodeći kvantizaciju i Bohorv magneton

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$$

dobivamo kvantnomehaničku relaciju za magnetski moment:

$$\mu = -\frac{e}{2m_e} \frac{\hbar}{\hbar} L = -\frac{\mu_B}{\hbar} L.$$

## Magnetski moment atoma

Atom, kao jedinstvena konfiguracija, može imati tri kvantnomehanička magnetska momenta, što odgovaraju njegovim mehaničkim momentima – orbitalnom, spinskom i ukupnom kutnom momentu. To su tri temeljne kvantnomehaničke relacije.

1. Orbitalni magnetski moment atoma:

$$\vec{\mu}_L = -\frac{\mu_B}{\hbar} \cdot \vec{L} \quad \text{ i } \quad \mu_L = \mu_B \cdot \sqrt{L(L+1)}$$

2. Spinski magnetski moment atoma:

$$\vec{\mu}_S = -2\frac{\mu_B}{\hbar} \cdot \vec{S} \quad \text{ i } \quad \mu_S = 2\mu_B \cdot \sqrt{S(S+1)}$$

Faktor 2 dolazi iz Diracovog relativističkog računanja svojstava elektrona, što je u skladu s pokusima.

3. Ukupni kutni magnetski moment atoma:

$$\vec{\mu}_J = -q\frac{\mu_B}{\hbar} \cdot \vec{J} \quad \text{ i } \quad \mu_J = q\mu_B \cdot \sqrt{J(J+1)}$$

U svim gornjim relacijama koje definiraju magnetske momente atoma, negativan predznak („-“) označava da je vektor magnetskog momenta suprotnog smjera (antikolinearan) supripadnom vektoru mehaničkog momenta.

Konstanta  $\mu_B$  je Bohrov magneton elektrona:

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 9,274 \cdot 10^{-24} \text{ JT}^{-1} = 5,788 \cdot 10^{-24} \text{ MeVT}^{-1} = 5,788 \cdot 10^{-5} \text{ eVT}^{-1}$$

Faktor  $q$  se uobičajeno zove Landéov  $q$ -faktor, prema fizičaru koji je prvi izveo taj izraz:

$$q = 1 + \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)} = \frac{3J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)}$$

Ukupni kutni moment atoma

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} = \sum_k (\vec{L}_k + \vec{S}_k), \quad \vec{L} = \sum_k \vec{L}_k \quad \text{ i } \quad \vec{S} = \sum_k \vec{S}_k$$

Karakteristične vrijednosti za  $q$  su:

- $q = 2$  ( $L=0$ )  $\longrightarrow$  doprinose isključivo spinski magnetski momenti
- $q = 1$  ( $S=0$ )  $\longrightarrow$  doprinose samo orbitalni magnetski momenti

Vrijednost  $q_s = 2$  za elektron je jedna od najbolje izmjerenih veličina u prirodi:

$$q_s = 2,0023193043718 \pm 0,0000000000076$$

Zašto ne baš točno 2? Na osnovu svoje poznate relativističke jednačbe, Dirac je točno predvidio 2. Odstupanje od 2 jest stvarna pojava i naziva se anomalni magnetski moment elektrona. Tumačenje je u okviru kvantne teorije polja (R.Feynmann) i nadilazi namjere ovog kolegija.

U našim primjenama računamo s  $q_s = 2$ .



## Oslikavanje magnetskom rezonancijom, MRI (Magnetic Resonance Imaging)

Najvažnije inženjerske primjene kvantne mehanike u našem vremenu su: nuklearna magnetska rezonancija (NMR) i kvantno računarstvo.

NMR-a je potpuno razvijena tehnologija koja se svakodnevno primjenjuje u medicini, industrijskim primjenama, u brojnim novih tehnologijama i u temeljnim znanostima. S druge strane, kvantno računarstvo je u pogledu inženjerskih primjena još u razvojnoj fazi!

NMR ili MRI se odlikuje važnim prednostima prema standardnim tehnikama X-zračenja i moderne CT metode. U pogledu ljudskog organizma, X-zrake ioniziraju atome u tijelu izazivajući rizik (opasnost) od pojave raka pri viskim dozama, ili pak razaranje tkiva pri najvišim dozama. S druge strane, opasni zdravstveni rizici u primjeni kratkotrajnih jakih magnetskih polja još nisu dokazani. NMR oslikava mekano tkivo bolje i dublje nego X zrake jer se one u tkivu manje gustoće manje raspršuju od gustog materijala poput kostiju.

NMR metoda je povezana s vodikovim atomima odnosno lakim i teškim jezgrama s neparnim brojem nukleona, tako da daje informaciju o nuklearnom (kemijskom) sastavu tkiva. Izgleda da jedini nedostatak NMR-a, u usporedbi s X-cijevima dolazi iz visoke cijene koštanja uređaja.

Zbunjujuće i odbijajuće stavove u pogledu NMR-a dolaze možda zbog „nuklearna“ u nazivu nuklearna magnetska rezonancija. Pacijenti ili korisnici često s predrasudama pomišljaju da je pridjev „nuklearna“ povezan s nuklearnim bombama, nuklearnim otpadom i slično. Baš nasuprot: radi se o neinvanzivnoj i benignoj, znanstvenoj metodi o rezonantnom prevrtanju jezgara u magnetskom polju koje prati precesija i reemisija zračenja na rezonantnoj frekvenciji. Unatoč svemu, mnogi stručnjaci i fizičari više vole reći da je riječ o „oslikavanju magnetskom rezonancijom (MRI)“ nego li o „nuklearnoj magnetskoj rezonanciji“.

U duhu inženjerskih primjena, bitna razlika između NMR-a i CT-metoda jest stvarno vrijeme upotrebe (operiranja) uređaja. CT-metoda daje podatke i slike na skali od 1 sekunde, a NMR zahtijeva vremena od 10-60 minuta pretraživanja pacijenta i dobivanja i snimanja slika.

NMR je revolucionirala dijagnostičku medicinu, naročito u bolestima mozga i živčanog sustava i njihovoj prevenciji. U pogledu znanstvenih istraživanja, NMR je otvorila nove mogućnosti u neuroznanostima jer se mogu najfinije „osvijetliti“ („light up“) različiti dijelovi mozga i njegovih funkcija.

## Fizikalna slika magnetske rezonancije. Prevrtnanje protonâ (vodikovih atoma) u magnetskom polju.

Magnetska rezonancija temelji se na međudjelovanju protonâ u vodikovu atomu s vanjskim magnetskim poljem. Pogledajmo vodikov atom u statičkom magnetskom polju  $\vec{B} = B_0 \hat{z}$  koje djeluje u smjeru osi z (jedinичni vektor  $\hat{z}$ ), prema slici 1.

Magnetski moment protona  $\vec{\mu}_p$  sličan je kvantnomehaničkom izrazu za moment elektrona:

$$\mu_s = -\frac{g_s \mu_B}{\hbar} \vec{S} \qquad \mu_s = \frac{g_p \mu_B}{\hbar} \frac{m_e}{m_p} \vec{S} \qquad (1)$$

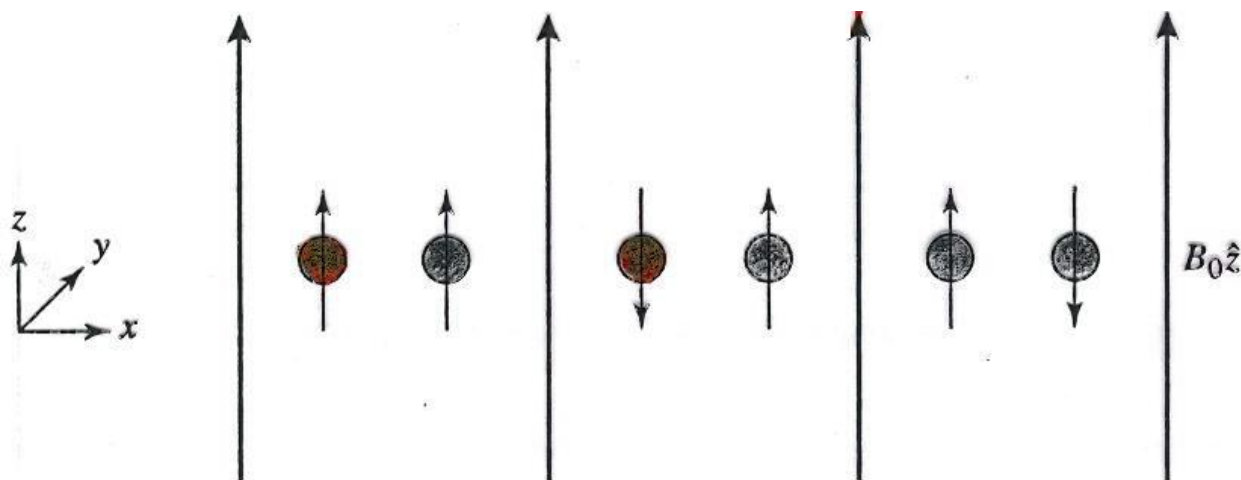
Magnetski moment elektrona.

Magnetski moment protona.

Eksperimentalni podatak za  $g$  – faktor za proton jest  $g_p = 5,59$  a za elektron uzimamo  $g_s = 2$ . Proton (barion, pozitivna čestica) i elektron (lepton, negativna čestica) imaju suprotne naboje, a omjer masa  $m_e$  i  $m_p$  dolaze zbog činjenice da je magnetski moment obrnuto razmjeran masi čestice. U obje formule jest  $\mu_B$  Bohrov magneton za elektron, a  $\vec{S}$  jest spin (spinski kutni moment) elektrona.

U formuli (1), omjer masa čestica za magnetski moment protona, na temelju eksperimentalnih podataka iznosi:

$$\frac{m_e}{m_p} = \frac{9,1094 \cdot 10^{-31} \text{ kg}}{1,6726 \cdot 10^{-27} \text{ kg}} = \frac{0,511 \text{ MeV}/c^2}{938,3 \text{ MeV}/c^2} = 5,446 \cdot 10^{-4}$$



Slika 1. Protoni u vodikovu atomu se orijentiraju u smjeru magnetskog polja  $B_0 = B_0 \hat{z}$ , u smjeru paralelno ili antiparalelno magnetskom polju.

U vanjskom magnetskom polju  $\vec{B}$  proton ima potencijalnu energiju:

$$U = -\vec{\mu}_p \cdot \vec{B} \quad (2)$$

Ako je polje postavljeno u z smjeru i ima iznos  $B_0$ ,  $\vec{B} = B_0\hat{z}$ , proton će imati dva svojstvena stanja hamiltonijana, s dvije različite energije (na slici 1):

$$E = -\frac{g_p\mu_B}{2} \frac{m_e}{m_p} B_0 \quad \text{ili} \quad E = \frac{g_p\mu_B}{2} \frac{m_e}{m_p} B_0 \quad (3)$$

orijentacija spin gore u +z smjeru                      ili                      orijentacija spin dolje u –z smjeru.

Pretpostavimo da sada smetnju u obliku elektromagnetskog vala unosimo u taj sustav. Uzmimo magnetsku komponentu toga vala u jednostavnom matematičkom obliku  $B_1 \cos(\omega t)$  i da ona djeluje okomito na z –smjer, na primjer u smjeru osi x:

$$\vec{B}_1 = B_1 \cos(\omega t) \hat{x} \quad (\hat{x} = \text{jedinični vektor}) \quad (4)$$

Što se događa s protonskim spinom (protonom) kad na njega djeluje magnetsko polje? Kvantna mehanika dokazuje da postoji vjerojatnost da se proton prevrće („to flip“) u suprotno z stanje spina, poput prevrtanja elektrona u takvoj situaciji.

Objasnimo detalje prevrtanja spina protonu u harmoničkom magnetskom polju  $\vec{B}_1$  (rel. 4). Proton je u početnome stanju  $\langle \uparrow |$  sa spinom prema gore u +z smjeru, a promjenjivo magnetsko polje, trenu  $t=0$  djeluje u smjeru osi x. Želimo odrediti vjerojatnost da će proton prijeći u stanje  $|\downarrow\rangle$  sa spinom prema dolje nakon nekog vremena  $t$ . Uzmimo još da se proces prevrtanja spina događa u blizini rezonantne frekvencije  $\omega_0$ . Budući da stacionarno polje  $\vec{B}_0 = B_0\hat{z}$  djeluje u z smjeru, spin-gore stanje  $\langle \uparrow |$  protona ima početnu energiju  $E_i$  (initial energy) a spin-dolje  $|\downarrow\rangle$  imat će konačnu energiju  $E_f$  (final energy):

$$E_i = -\frac{g_p\mu_B}{2} \frac{m_e}{m_p} B_0 \quad E_f = \frac{g_p\mu_B}{2} \frac{m_e}{m_p} B_0 \quad (5)$$

Za rezonantnu (pozitivnu) frekvenciju  $\omega_0$  vrijedi osnovna kvantnomehanička jednadžba:

$$\omega_0 \hbar = E_f - E_i \quad \rightarrow \quad \omega_0 = \frac{E_f - E_i}{\hbar} = \frac{\frac{g_p\mu_B}{2} \frac{m_e}{m_p} B_0}{\hbar} \quad (6)$$

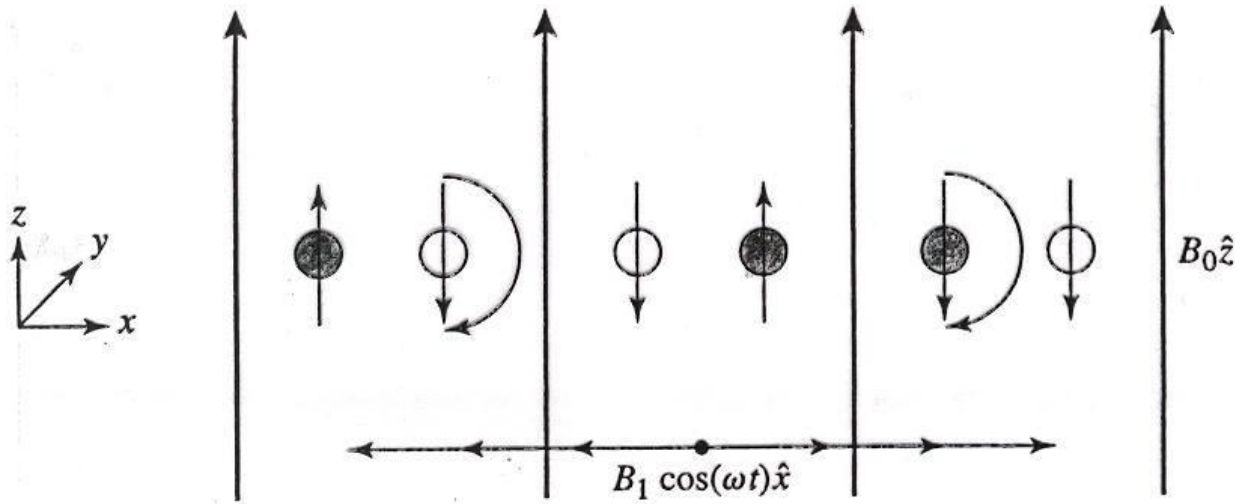
Smetnju zbog promjenjivog harmoničkog magnetskog polja  $H_1(t)$ , u okviru računa smetnje, pišemo u obliku  $H_1(t) = \mathcal{H}_1 \cos(\omega t)$ . Faktor  $\mathcal{H}_1$  opisuje energiju (vremenski nezavisan faktor) i pišemo ga kao:

$$\mathcal{H}_1 = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}_1. \quad (7)$$

Vidimo da  $\mathcal{H}_1$  odgovara potencijalnoj energiji protona u magnetskom polju (rel. 2). Budući da gledamo evoluciju orijentacije spina protona, u računu treba uzeti u obzir magnetsko moment protona  $\mu_p$  i spinski moment  $\vec{S}$  (rel. 1):

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_1 &= -\vec{\mu}_p \cdot \vec{B}_1 = -\mu_{px} B_1 \\ &= -B_1 \left( \frac{g_p \mu_B}{\hbar} \frac{m_e}{m_p} \right) S_x \\ &= -B_1 \frac{g_p \mu_B}{\hbar} \frac{m_e}{m_p} \frac{\hbar}{2} \sigma_x \\ &= -B_1 \frac{g_p \mu_B}{2} \frac{m_e}{m_p} \sigma_x \end{aligned} \quad (8)$$

gdje je  $S_x$  spinski moment protona u smjeru  $x$ -osi. Svojstvene vrijednosti matrice  $S_x$  su  $\pm \frac{\hbar}{2}$  za orijentaciju spina  $+\frac{\hbar}{2}$  u  $+x$  smjeru odnosno  $-\frac{\hbar}{2}$  u  $-x$  smjeru. Matrica  $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$  jest Paulijeva matrica spina, tako da je  $S_x = \frac{\hbar}{2} \sigma_x$ .



Slika 2. Prevrtnanje spina protona kad na njega djeluje harmoničko magnetsko polje  $\vec{B}_1 = B_1 \cos(\omega t) \hat{x}$  u smjeru  $\hat{x}$ .

Prevrtanje spina protona zbog smetnje uslijed polja  $\vec{B}_1$  prikazana je na slici 2. Prijelaz (prevrtanje) iz početnog u konačno stanje, kvantnomehanički računamo kao:

$$\langle \psi_f | \mathcal{H}_1 | \psi_i \rangle = \left\langle \downarrow \left| -B_1 \frac{g_p \mu_B}{2} \frac{m_e}{m_p} \sigma_x \right| \uparrow \right\rangle \quad (9)$$

odnosno u matričnome obliku

$$\langle \psi_f | \mathcal{H}_1 | \psi_i \rangle = B_1 \frac{g_p \mu_B}{2} \frac{m_e}{m_p} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = B_1 \frac{g_p \mu_B}{2} \frac{m_e}{m_p} \quad (10)$$

Kvantna mehanika u okviru vremenski ovisnog računa smetnje nam daje korisne (upotrebljive) formule. Smetnja  $H_1(t)$  se može faktorizirati u vremenski neovisno član  $\mathcal{H}_1$  i vremenski zavisni dio  $f(t)$ :  $H_1(t) = \mathcal{H}_1 f(t)$ .

U našem slučaju smetnja magnetskog polja je harmonička. Za smetnju  $H_1 = \mathcal{H}_1 \cos(\omega t)$ , koja se uključuje u  $t = 0$  do kratkog (konačnog) vremena  $t_f$ , moguće je vjerojatnost prijelaza  $P(i \rightarrow f)$  opisati pomoću amplitude  $c_f$ :

$$c_f = \frac{1}{i\hbar} \langle \psi_f | \mathcal{H}_1 | \psi_i \rangle \int_0^{t_f} dt \cos(\omega t) e^{i(E_f - E_i)t/\hbar} \quad (11)$$

Budući da smo u rel. (6) definirali rezonantnu frekvenciju  $\omega_0$  i da  $\cos(\omega t)$  možemo eksponencijalno raspisati kao:

$$\cos(\omega t) = \frac{e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}}{2}$$

relacija (11) dobiva pogodni efekt za integriranje:

$$c_f = \frac{1}{i\hbar} \langle \psi_f | \mathcal{H}_1 | \psi_i \rangle \int_0^{t_f} dt \frac{1}{2} (e^{i(\omega_0 + \omega)t} + e^{i(\omega_0 - \omega)t})$$

$$c_f = \frac{1}{i\hbar} \langle \psi_f | \mathcal{H}_1 | \psi_i \rangle \frac{1}{2} \left[ \frac{1}{i(\omega_0 + \omega)} (e^{i(\omega_0 + \omega)t_f} - 1) + \frac{1}{i(\omega_0 - \omega)} (e^{i(\omega_0 - \omega)t_f} - 1) \right] \quad (12)$$

Ovaj izraz (amplituda) je kompleksan i treba ga pojednostaviti za dane vrijednosti od  $\omega$ . Znamo da je  $E_f > E_i$  i da je  $\omega_0 > 0$ . Dakle, ako je  $\omega$  blizu  $\omega_0$ , drugi član u uglastim zagradama u rel. (12) prevladava nad prvim jer je  $\frac{1}{(\omega_0 + \omega)} \gg \frac{1}{(\omega_0 - \omega)}$ . Zanemarivanjem prvog člana u formuli (12), dobivamo konačnu relaciju za vjerojatnost prijelaza:

$$P(i \rightarrow f) = |c_f|^2 = \frac{|\langle \psi_f | \mathcal{H}_1 | \psi_i \rangle|^2}{4\hbar^2} \frac{\sin^2 \left[ (\omega - \omega_0) \frac{t}{2} \right]}{\left[ \frac{(\omega - \omega_0)}{2} \right]^2} \quad (13)$$

Uvrstimo li relaciju (10) za prevrtanje spina protona u magnetskom polju u relaciju (13), dobivamo vjerojatnost prijelaza protona iz nižeg energijskog stanja (stanja gore) u više energijsko stanje (stanje dolje):

$$P(i \rightarrow f) = \frac{B_1^2 \cdot \frac{g_p^2 \mu_B^2 m_e^2}{4 m_p^2}}{4\hbar^2} \cdot \frac{\sin^2 \left[ (\omega - \omega_0) \frac{t}{2} \right]}{\left[ \frac{(\omega - \omega_0)}{2} \right]^2} \quad (14)$$

Uz formulu (14) vrijedi rezonantna frekvencija  $\omega_0$ , koju smo definirali u rel. (6):

$$\omega_0 = \frac{\frac{g_p \mu_B m_e}{2 m_p} B_0}{\hbar}. \quad (15)$$