

Пријељен:

Ориј. јед.

бр. 5

одлука

Министар

0603

9/135

UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET
Institut za fiziku

Aleksandra S. Trifunac

FONONSKA STANJA U DEFORMISANIM STRUKTURAMA

Diplomski rad

mentor: dr Jovan P. Šetrajčić

NOVI SAD, jula 1994.

"Teorija koja daje odgovarajuće rezultate, nesumnjivo sadrži veliki ideo istine"

G.A. Lorenc

Koristim priliku da se zahvalim svojim roditeljima i sestri na podršci i strpljenju, kao i mentoru dr Jovanu P. Šetrajčiću i mr Milanu Pantiću.
Posebnu zahvalnost dugujem Snežani na saradnji i Vinku na tehničkoj realizaciji ovog rada.

SADRŽAJ

UVOD.....	4
1. FONONI U IDEALNIM KRISTALIMA.....	6
1.1 Linearni harmonijski oscilator u reprezentaciji druge kvantizacije.....	6
1.2 Fononska pobuđenja u kristalu.....	12
2. FONONI U TANKIM FILMOVIMA.....	22
2.1 Fononski spektri u deformisanim filmovima.....	22
ZAKLJUČAK.....	36
DODATAK.....	37
LITERATURA.....	39

UVOD

U teorijskoj fizici čvrstog stanja najčešće se analiziraju idealne strukture koje su prostorno homogene i koje poseduju osobinu translacione invarijantnosti. Međutim, poznato je da u praksi čistih izotropnih kristala nema. Svaka realna kristalna struktura poseduje izvestan procenat nečistoća (primesa, defekata, vakancija) kao i granične površine. Postojanje graničnih površina narušava translacionu simetriju kristala. Na stepen narušenja simetrije utiču takođe i nečistoće. Sva ova odstupanja od idealnih struktura kao rezultat daju specifične efekte koji su vrlo važni za praktičnu primenu.

Ukoliko bi se ovakve strukture analizirale metodama koje se koriste za idealne strukture ovi specifični efekti bi ostali "nevidljivi", tako da metodologija istraživanja neidealnih struktura ima veliki značaj i usklađena je sa potrebama moderne tehnike i tehnologije.

Da bi se doobile strukture sa izraženim efektima koriste se metode moderne tehnologije za sintetizovanje, koje su određene teorijskim modelom. U tom cilju se posmatraju fononska stanja u strukturama sa narušenom translacionom simetrijom.

Zašto baš fononi?

Fononi su osnovna pobuđenja u kristalima. Fononski podsistemi su uvek prisutni bez obzira da li se radi o elektronima, eksitonima ili nekom drugom tipu elementarnih eksitacija. Dakle, oni su glavni nosioci mehanizama koji "proizvode" određene fizičke osobine, pojave i efekte u kristalu. Oni se lako termalno pobuđuju i prisutni su već sa malim porastom temperature iznad 0 K. Značajno je dakle, prvo ispitati fonone.

Teorijski se fononska stanja u kristalu mogu proučavati metodom perturbacije, Hajzenbergovim jednačinama kretanja, metodom Grinovih funkcija ... , dok se eksperimentalno oni mogu proučavati rasejanjem x-zraka i neutrona na kristalima. Ovakvi eksperimenti pružaju najbolju mogućnost određivanja disperzionih relacija za fonone tj. daju zavisnost frekvencije od talasnog vektora.

Suština ovog rada je proučavanje takvih deformisanih filmova sa narušenom translacionom simetrijom duž jednog pravca i to sve u cilju određivanja uslova visokotemperaturne superprovodljivosti.

Model koji se pri tome analizira temelji se na deformaciji raspodele stranih atoma duž Z-pravca dobijen spaterovanjem tih atoma u osnovnu matricu. Ideja je da se određenom distribucijom masa stvori takva deformacija koja bi kao rezultat dala višu kritičnu superprovodnu temperaturu.

Prvi deo rada analizira jednodimenzionale i trodimenzione fononske sisteme za idealne strukture. Dat je i opis linearног harmonijskog oscilatora.

Drugi deo rada obrađuje deformisane tanke filmove za asimetričan slučaj spaterovanja. Dobijeni zakon disperzije kao i aktivaciona temperatura, tj. temperatura do koje se film ponaša kao apsolutno "zamrznuta" struktura.

U četvrtoj glavi dati su zaključci, iza čega matematički dodatak, a na kraju literatura.

1. FONONI U IDEALNIM KRISTALIMA

-linearni harmonijski oscilator u reprezentaciji druge kvantizacije

-fononska pobuđenja u kristalu

1. FONONI U IDEALNIM KRISTALIMA

Atomi kristalne rešetke ne miruju, oni osciluju oko svojih idealizovanih položaja ravnoteže. Pokazalo se da su te oscilacije odgovorne za određene fizičke osobine kristala kao što su temperatura, električna provodnost i dr.

Pri detaljnijoj analizi kretanja atoma u kristalu pretpostavlja se da atomi vrše harmonijske oscilacije oko svojih ravnotežnih položaja u čvorovima rešetke. Ovakvo kretanje je prouzrokovano elastičnim silama, kojima na svaki atom (molekul) deluju ostali atomi iz kristalne rešetke, tako da se kristal može tretirati kao sistem povezanih oscilatora.

Kolektivno kretanje atoma kristalne rešetke predstavlja se elastičnim talasima čija energija može imati samo diskretne vrednosti $\hbar\omega_k(n + \frac{1}{2})$; $n=0,1,2,\dots$. Svakom odvojenom kvantu energije talasa može se pripisati impuls $p_k = \hbar k$. Uveden na ovaj način kvant energije, kojim se prenosi zvučni talas u kristalu naziva se fonon. Dakle, kada je reč o kristalima fonon se tretira kao pobuđenje celog kristala. Pojam fonona se uvodi prilikom kvantno-mehaničke analize linearog harmonijskog oscilatora.

1.1 Linearan harmonijski oscilator u reprezentaciji druge kvantizacije

Jednodimenziono kretanje materijalne tačke na koju deluje restituciona sila iz nepokretnog centra, proporcionalna rastojanju tog centra, čini linearni harmonijski oscilator. On predstavlja kvantno-mehanički sistem koji se koristi kao osnovni model pri rešavanju problema oscilovanja atoma kristalne rešetke.

Kvantno-mehanička analiza linearog harmonijskog oscilatora u koordinatnoj reprezentaciji daje sledeće rezultate [3]:

a) energija linearog harmonijskog oscilatora je diskretna veličina:

$$E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}) ; \quad n = 0,1,2,\dots$$

gde je:

- n glavni kvantni broj
- ω frekvencija oscilovanja

b) razlika energije pri prelasku iz stanja $n \rightarrow n+1$:

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = \hbar\omega$$

Nivoi energije su ekvidistantni. Ovaj najmanji kvant pobuđenja, energije $\hbar\omega$ zove se **fonon**.

c) talasna funkcija linearog harmonijskog oscilatora:

$$\Psi_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n(\xi) e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$$

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} (e^{-\xi^2}) \quad (1.1)$$

$H_n(\xi)$ -Ermitovi polinomi reda n

Vrednost glavnog kvantnog broja u potpunosti određuje stacionarno stanje oscilatora. Za $n=1$ sledi jednofononsko stanje; $n=2$ sledi dvofononsko stanje itd. Drugim rečima, svaki kvant najmanjeg pobuđenja oscilatora naziva se fononom. Tada će kvantni broj n određivati broj fonona u odgovarajućem stanju. Stacionarno stanje je u potpunosti određeno datom vrednošću broja fonona. Zato umesto funkcije $\Psi_n(\xi)$ ovo stanje se može okarakterisati funkcijom u kojoj se kao nezavisna promenljiva javlja broj fonona. Ta funkcija se označava simbolom $|n\rangle$.

$$\Psi_n(\xi) \rightarrow |n\rangle \quad (1.2)$$

gde je ξ bezdimenziona koordinata.

Kako se broj fonona u sistemu menja potrebno je uvesti operatore koji opisuju tu promenu:

$$\hat{b} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi + \frac{d}{d\xi} \right) \quad (1.3)$$

$$\hat{b}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right) \quad (1.4)$$

Ovi operatori zadovoljavaju komutacionu relaciju:

$$[\hat{b}, \hat{b}^+] = 1 \quad (1.5)$$

Dejstvo operatora \hat{b} i \hat{b}^+ na funkciju (1.2) određeno je jednakostima:

$$\hat{b} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle \quad (1.6)$$

$$\hat{b}^+ |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle \quad (1.7)$$

Operatori \hat{b} i \hat{b}^+ utiču na broj fonona. Pri tom, \hat{b} smanjuje broj fonona za jedinicu i naziva se operator anihilacije fonona. Operator \hat{b}^+ uvećava broj fonona za jedinicu i naziva se operator kreacije fonona. Ovi operatori su u potpunosti određeni sa (1.3), (1.4), (1.6), (1.7).

Operator koji prebrojava fonone u sistemu je operator broja fonona \hat{n} :

$$\hat{n} = \hat{b}^+ \cdot \hat{b} \quad (1.8)$$

Dejstvo operatora \hat{n} na funkciju (1.2) određeno je jednakošću:

$$\hat{n}|n\rangle = n|n\rangle \quad (1.9)$$

Svojstvene vrednosti operatora \hat{n} su jednake broju fonona u datom stanju. Ovakva reprezentacija talasne funkcije i operatora zove se reprezentacija druge kvantizacije.

Osnovno stanje sistema, stanje bez fonona $n=0$ opisano funkcijom stanja $|0\rangle$ zove se vakuumsko stanje. Energija vakuumskog stanja je:

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega$$

Vakuumsko stanje se može odrediti iz uslova:

$$\hat{b}|0\rangle \stackrel{\text{def}}{=} 0$$

Pozivajući se na (1.3) sledi:

$$\frac{d|0\rangle}{d\xi} + \xi|0\rangle = 0$$

Ovo je diferencijalna jednačina I reda i njeno rešenje je oblika:

$$|0\rangle = C_0 e^{-\xi^2} \quad (1.10)$$

C_0 predstavlja konstantu integracije koja se određuje iz uslova normiranosti talasne funkcije.

$$\langle 0|0\rangle = C_0^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} d\xi = 1$$

odakle sledi:

$$C_0 = \sqrt[4]{\frac{1}{\pi}}$$

Uvrštavajući C_0 u (1.10) dobija se izraz za vakuumsko stanje:

$$|0\rangle = \sqrt[4]{\frac{1}{\pi}} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \quad (1.11)$$

Dejstvujući n puta operatorom \hat{b}^+ na vakuumsko stanje, koristeći (1.7), može se dobiti funkcija stanja sa n fonona.

$$(\hat{b}^+)^1 |0\rangle = \sqrt{1} |1\rangle$$

$$(\hat{b}^+)^2 |0\rangle = \sqrt{1 \cdot 2} |2\rangle$$

• • •

$$(\hat{b}^+)^n |0\rangle = \sqrt{n!} |n\rangle$$

odakle sledi izraz:

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{b}^+)^n |0\rangle \quad (1.12)$$

Ako se u (1.12) uvrsti (1.11) dobija se:

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n! \sqrt{\pi}}} (\hat{b}^+)^n e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \quad (1.13)$$

Koristeći identitet

$$\xi - \frac{d}{d\xi} = -e^{\frac{1}{2}\xi^2} \frac{d}{d\xi} (e^{\frac{1}{2}\xi^2})$$

i (1.4) dobija se:

$$|n\rangle = \sqrt{\frac{1}{2^n n! \sqrt{\pi}}} \left(-e^{\frac{1}{2}\xi^2} \frac{d}{d\xi} (e^{\frac{1}{2}\xi^2}) \right)^n$$

To se može napisati:

$$|n\rangle = \sqrt{\frac{1}{2^n n! \sqrt{\pi}}} \cdot e^{\frac{1}{2}\xi^2} (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} (e^{-\xi^2}) \quad (1.14)$$

Na osnovu definicije Ermitovih polinoma (1.1), (1.14) se može napisati:

$$|n\rangle = \sqrt{\frac{1}{2^n n! \sqrt{\pi}}} \cdot e^{\frac{1}{2}\xi^2} H_n(\xi) \quad (1.15)$$

Izraz (1.15) predstavlja funkciju stanja sa n fonona u reprezentaciji druge kvantizacije, koji je identičan izrazu u koordinatnoj reprezentaciji.

Hamiltonov operator u koordinatnoj reprezentaciji ima oblik:

$$H_n(\xi) = \frac{\hbar\omega}{2} \left(\xi^2 - \frac{d^2}{d\xi^2} \right) \quad (1.16)$$

gde je:

$$\xi = x \left(\omega \frac{m}{\hbar} \right)^{\frac{1}{2}}$$

x koordinata

Koristeći (1.5), (1.8) i izraz za operatorsku razliku kvadrata:

$$\xi^2 - \frac{d^2}{d\xi^2} = \frac{1}{2} \left[\left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right) \left(\xi + \frac{d}{d\xi} \right) + \left(\xi + \frac{d}{d\xi} \right) \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right) \right]$$

dobija se izraz za Hamiltonov operator u reprezentaciji druge kvantizacije.

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{n} + \frac{1}{2} \right) \quad (1.17)$$

Odatle se zaključuje da operator broja fonona \hat{n} i Hamiltonov operator \hat{H} komutiraju
 $[\hat{H}, \hat{n}] = 0$, što znači da se u reprezentaciji druge kvantizacije mogu istovremeno meriti energija i broj fonona sistema.

Dejstvo operatora \hat{H} (1.17) na funkciju (1.2) određeno je jednakošću:

$$\hat{H} |n\rangle = E_n |n\rangle$$

Svojstvene vrednosti operatora \hat{H} :

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (1.18)$$

iste su kao i svojstvene vrednosti dobijene u koordinatnoj slici.

Ideja prelaska na reprezentaciju druge kvantizacije sastoji se u tome da se pronađe matematička slika koja bi fizički bila ekvivalentna koordinatnoj slici, a koja bi imala kao nov argument broj fonona n .

1.2 Fononska pobuđenja u kristalu

Pri ispitivanju oscilatornih karakteristika, kristal se razmatra kao sistem vezanih linearnih harmonijskih oscilatora. Pokazuje se da se kolektivno oscilovanje atoma može svesti na oscilovanje sistema nezavisnih oscilatora.

U formalnom matematičkom smislu, to se svodi na određivanje takve unitarne transformacije koja bi hamiltonijan sistema vezanih oscilatora prevela u hamiltonijan sistema nezavisnih oscilatora.

U ovoj analizi najpre se formuliše klasični hamiltonijan sistema vezanih oscilatora, pri čemu se posmatra najjednostavniji monoatomni kubni kristal. Dat hamiltonijan ima oblik:

$$H = \sum_{\vec{n}} H_{\vec{n}} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}, \vec{m}} V(\vec{n} - \vec{m}) \quad (1.19)$$

gde su:

$$H_{\vec{n}} = \frac{\vec{p}_{\vec{n}}^2}{2M} \text{ -hamiltonijan izolovanog atoma na mestu } \vec{n} \text{ u kristalu}$$

$$V(\vec{n} - \vec{m}) \text{ -potencijal interakcije atoma na mestima } \vec{n} \text{ i } \vec{m}$$

Funkcija $V(\vec{n} - \vec{m})$ je parna tj. važi da je $V(\vec{n} - \vec{m}) = V(\vec{m} - \vec{n})$.

Ovaj izraz je tačan samo na $T=0$ K, tačnije rečeno samo u slučaju potpuno "zamrznutog" kristala. Na svim temperaturama atomi osciluju oko svojih ravnotežnih položaja, tako da se trenutni položaj atoma karakteriše vektorima:

$$\vec{n} \rightarrow \vec{n} + \vec{u}(\vec{n}) ; \vec{m} \rightarrow \vec{m} + \vec{u}(\vec{m})$$

gde su $\vec{u}(\vec{n})$ i $\vec{u}(\vec{m})$ pomeranja atoma oko mesta \vec{n} i \vec{m} u kristalu.

Operator interakcije $V(\vec{n} - \vec{m})$ zbog toga prelazi u:

$$V(\vec{n} - \vec{m}) \rightarrow V\{(\vec{n} - \vec{m}) + [\vec{u}(\vec{n}) - \vec{u}(\vec{m})]\} \quad (1.20)$$

Pošto su na niskim temperaturama pomeraji $\vec{u}(\vec{n})$ mali, koristeći standardnu teoriju malih oscilacija, relacija (1.20) razvija se u stepeni red po Dekartovim komponentama $u_\alpha(\vec{n})$ vektora $\vec{u}(\vec{n})$ oko položaja ravnoteže.

$$V\{(\vec{n} - \vec{m}) + [\bar{u}(\vec{n}) - \bar{u}(\vec{m})]\} = V_o(\vec{n} - \vec{m}) + \sum_{\alpha} \left[\frac{\partial V(\vec{n} - \vec{m})}{\partial(\vec{n} - \vec{m})_{\alpha}} \right]_o [\bar{u}_{\alpha}(\vec{n}) - \bar{u}_{\alpha}(\vec{m})] + \\ + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \left[\frac{\partial^2 V(\vec{n} - \vec{m})}{\partial(\vec{n} - \vec{m})_{\alpha} \partial(\vec{n} - \vec{m})_{\beta}} \right]_o [u_{\alpha}(\vec{n}) - u_{\alpha}(\vec{m})] \cdot [u_{\beta}(\vec{n}) - u_{\beta}(\vec{m})] \quad (1.21)$$

$\alpha, \beta \in (x, y, z)$

Iz uslova stabilnosti sistema sledi da oscilovanje rešetke karakteriše treći član u izrazu (1.21). Ako se ovaj član sumira po svim čvorovima i doda mu se kinetička energija koja nastaje usled oscilovanja atoma, dobija se oscilatorni hamiltonijan sistema, oblika:

$$H = \sum_{\vec{n}, \alpha} \frac{p_{\alpha}^2(\vec{n})}{2M} + \frac{1}{4} \sum_{\vec{n}, \vec{m}, \alpha, \beta} C_{\alpha\beta}(\vec{n} - \vec{m}) [u_{\alpha}(\vec{n}) - u_{\alpha}(\vec{m})] \cdot [u_{\beta}(\vec{n}) - u_{\beta}(\vec{m})] \quad (1.22)$$

gde su:

$$C_{\alpha\beta}(\vec{n} - \vec{m}) = \left[\frac{\partial^2 V(\vec{n} - \vec{m})}{\partial(\vec{n} - \vec{m})_{\alpha} \partial(\vec{n} - \vec{m})_{\beta}} \right]_o \text{ Hukove konstante elastičnosti}$$

Kako sile između atoma najčešće brzo opadaju sa porastom rastojanja ($\vec{n} - \vec{m}$):

$$V(\vec{n} - \vec{m}) \approx \frac{1}{(\vec{n} - \vec{m})^p} ; p >> 1$$

to se potencijalna energija u izrazu (1.22) može napisati u aproksimaciji najbližih suseda. Aproksimacija se sastoji u tome da se sumiranje po \vec{n} i \vec{m} zamenjuje sumiranjem po \vec{n} i $\vec{\lambda}$, gde $\vec{\lambda}$ povezuje atom na mestu \vec{n} sa njegovim najbližim susedima. Kod idealnih kristala $\vec{\lambda}$ je isto za sve najbliže susede, pa sledi:

$$C_{\alpha\beta}(\vec{\lambda}) = C_{\alpha\beta}$$

U aproksimaciji najbližih suseda, hamiltonijan (1.22) dobija oblik:

$$H = \sum_{\vec{n}, \alpha} \frac{p_{\alpha}^2(\vec{n})}{2M} + \frac{1}{4} \sum_{\vec{n}, \vec{\lambda}, \alpha, \beta} C_{\alpha\beta} [u_{\alpha}(\vec{n}) - u_{\alpha}(\vec{n} - \vec{\lambda})] \cdot [u_{\beta}(\vec{n}) - u_{\beta}(\vec{n} - \vec{\lambda})] \quad (1.24)$$

Koristeći se formalizmom klasične mehanike, dobijaju se kanonske jednačine kretanja n-tog atoma:

$$\dot{u}_\alpha(\vec{n}) = \frac{\partial H}{\partial p_\alpha(\vec{n})} = \frac{p_\alpha(\vec{n})}{M}$$

$$\dot{p}_\alpha(\vec{n}) = -\frac{\partial H}{\partial u_\alpha(\vec{n})} = \sum_{\lambda\beta} \frac{C_{\alpha\beta}}{2} [u_\beta(\vec{n} + \vec{\lambda}) + u_\beta(\vec{n} - \vec{\lambda}) - 2u_\beta(\vec{n})] \quad (1.25)$$

Diferenciranjem prvog od ova dva izraza po vremenu i uvrštanjem drugog izvoda u prethodni dobija se sistem od tri diferencijalne jednačine kretanja za $u_\alpha(\vec{n})$:

$$Mu_\alpha(\vec{n}) = \frac{1}{2} \sum_{\lambda,\beta} C_{\alpha\beta} [u_\beta(\vec{n} + \vec{\lambda}) + u_\beta(\vec{n} - \vec{\lambda}) - 2u_\beta(\vec{n})] \quad (1.26)$$

Rešenje sistema (1.26) traži se u obliku ravnih talasa:

$$u_\alpha(\vec{n}) = A_\alpha(\vec{k}) e^{i(\vec{k}\vec{n} - t\omega(\vec{k}))} \quad (1.27)$$

Uvrštanje relacije (1.27) u (1.26) daje sistem homogenih algebarskih jednačina za nepoznate amplitude $A_\alpha(\vec{k})$:

$$\sum_\beta [\omega^2(\vec{k})\delta_{\alpha\beta} - f(\vec{k})C_{\alpha\beta}] A_\beta(\vec{k}) = 0$$

gde je:

$$f(\vec{k}) = \frac{2}{M} \sum_\lambda \sin^2 \frac{\vec{k}\vec{\lambda}}{2}$$

Da bi sistem imao netrivijalna rešenja mora biti zadovoljen uslov:

$$\det [\omega^2(\vec{k})\delta_{\alpha\beta} - f(\vec{k})C_{\alpha\beta}] = 0$$

Ovaj uslov za svaku vrednost \vec{k} daje tri pozitivna rešenja za dozvoljene frekvencije. Dakle, u kristalu postoji čitav spektar frekvencija $\omega = \omega(\vec{k})$ i njihova vrednost zavisi od talasnih dužina mehaničkih talasa koji se prostiru kroz kristal.

Hamiltonova funkcija (1.24) ako se p_α i u_α tretiraju kao operatori, predstavlja kvantno-mehanički hamiltonijan (operator energije sistema). Tada unitarna transformacija, kojom se ovaj hamiltonijan sistema vezanih oscilatora (1.24) svodi na hamiltonijan sistema nezavisnih oscilatora, sastoji se u razvijanju pomeranja $\vec{u}(\vec{n})$ po ravnim talasima tipa:

$$\vec{u}(\vec{n}) = \sum_{\vec{k}, j} \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_j(\vec{k})}} \vec{l}_j(\vec{k}) \left[\vec{b}_j^+(\vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{n} - it\omega_j(\vec{k})} + \vec{b}_j(\vec{k}) e^{-i\vec{k}\vec{n} + it\omega_j(\vec{k})} \right] \quad (1.29)$$

gde su:

$N = N_x N_y N_z$ broj atoma u elementarnoj celiji

$\vec{b}_j^+(\vec{k}), \vec{b}_j(\vec{k})$ boze operatori koji zadovoljavaju sledeće komutacione relacije:

$$[\vec{b}_i(\vec{k}), \vec{b}_j^+(\vec{l})] = \delta_{\vec{k}\vec{l}} \delta_{ij}; [\vec{b}_i(\vec{k}), \vec{b}_j(\vec{l})] = [\vec{b}_i^+(\vec{k}), \vec{b}_j^+(\vec{l})] = 0$$

$\vec{l}(\vec{k})$ -polarizacioni fononski vektori koji su normirani na sledeći način:

$$\vec{l}_i(\vec{k}) \cdot \vec{l}_j(\vec{k}) = \delta_{ij}; i, j \in (x, y, z)$$

Ovakav pristup predstavlja kvantno-mehanički (reprezentacija druge kvantizacije) tretman oscilatornih pojava u kristalu. Zamenom relacije (1.29) u (1.24) dobija se konačan izraz za hamiltonijan:

$$H = \sum_{\vec{k}, j} \left[b_j^+(\vec{k}) b_j(\vec{k}) + \frac{1}{2} \right] \hbar \omega_j(\vec{k}) \equiv \sum_{\vec{k}, j} H_j(\vec{k}) \quad (1.30)$$

Dakle, hamiltonijan je dat kao suma hamiltonijana nezavisnih oscilatora:

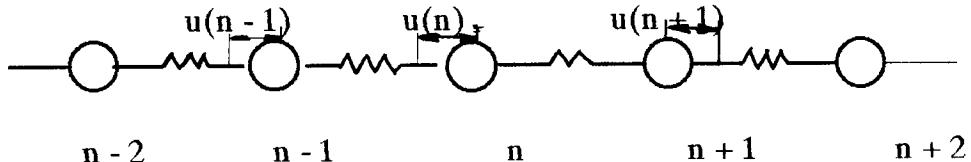
$$H_j(\vec{k}) = \left[n_j(\vec{k}) + \frac{1}{2} \right] E_j(\vec{k})$$

gde su:

$n_j(\vec{k}) = b_j^+(\vec{k}) b_j(\vec{k})$ -operator broja fonona impulsa $\hbar\vec{k}$ u pravcu j

$E_j(\vec{k}) = \hbar \omega_j(\vec{k})$ -energija tih fonona

Ako se posmatra linearna rešetka (jednodimenzionalni slučaj) sa prostom elementarnom celijom, onda na svaku elementarnu celiju dolazi po jedan atom mase M koji interaguje samo sa najbližim susedima. Na osnovu relacije (1.30) uzdužna i poprečna pomeranja atoma su međusobno nezavisna, pa se ovaj linearan niz može posmatrati kao niz atoma koji osciluju duž pravca koji ih spaja (sl.1.1).



Slika 1.1

Konkretizacijom uslova (1.28) za linearu rešetku sa prostom elementarnom celijom, dobija se disperziona relacija:

$$\omega(k) = \sqrt{4 \frac{C}{M} \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right)} \quad (1.31)$$

gde je C Hukova konstanta istezanja koja je ista za sve atome. Na ovom nivou moguće je izvesti sledeće zaključke.

a) Ukoliko je $ka \ll 1$ (dugotalasna aproksimacija), sledi:

$$\sin^2\left(\frac{ka}{2}\right) \approx \frac{k^2 a^2}{4}$$

U tom slučaju jednačina (1.31) se može zapisati kao:

$$\omega(k) \approx v k$$

gde je $v = a \sqrt{\frac{C}{M}}$ - brzina zvuka.

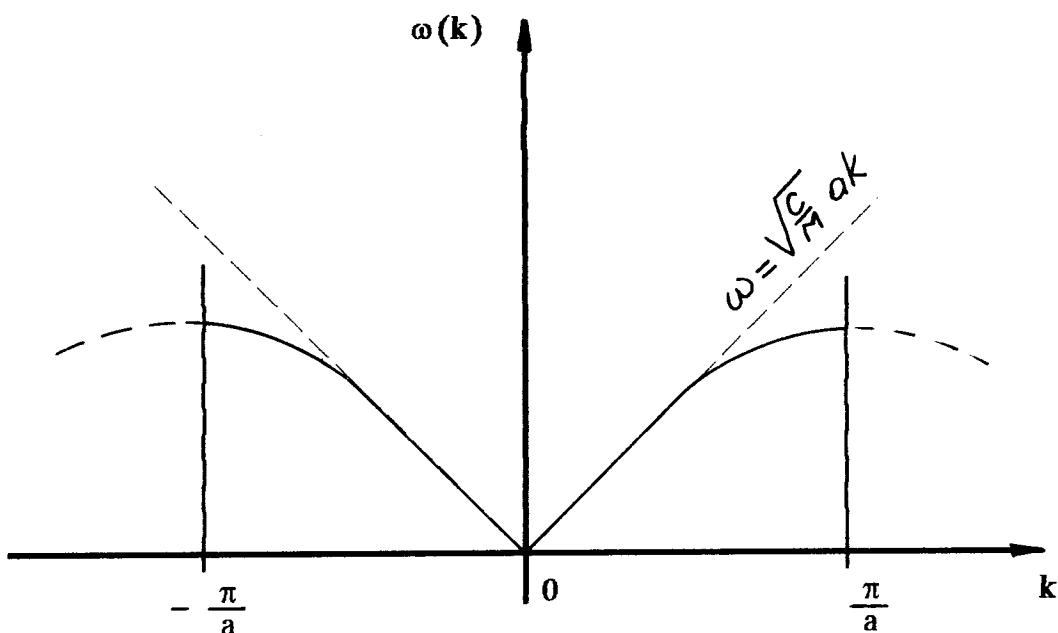
Prostiranje mehaničkih oscilacija kroz kristal je ustvari prostiranje zvučnih talasa. Postojanje linearne zavisnosti u ovom slučaju se objašnjava time što za talasne dužine mnogo veće od konstante rešetke ($\lambda \gg a$) njihova diskretna raspodela se može aproksimirati kontinualnom.

b) Pri velikim vrednostima k dolazi do odstupanja od linearne zavisnosti. Dolazi do disperzije.

Funkcija $\omega(k)$ ima maksimum (sl.1.2), iznad kojeg ni za jedno k nema oscilacija.

Ona je periodična za svaki talas k' koji zadovoljava uslov:

$$k' = k + \frac{2\pi}{a}v ; v = 0, 1, 2, \dots$$



Slika 1.2

Zavisnost frekvencije oscilovanja od talasnog broja za linearu monoatomnu rešetku

Interval $-\frac{\pi}{a} \leq k \leq \frac{\pi}{a}$ pokriva sve nezavisne vrednosti k i predstavlja Briluenovu zonu jednodimenzione rešetke.

Za kristal proste kubne strukture u dugotalasnoj aproksimaciji iz uslova (1.28) sledi:

$$\omega_\alpha(k) = v_\alpha k \quad (1.32)$$

$$v_\alpha = a \sqrt{\frac{C_{\alpha\alpha}}{M}} ; \alpha \in (x, y, z)$$

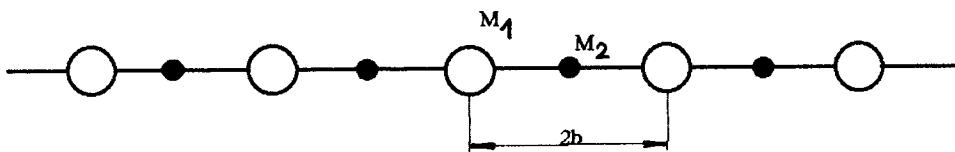
Pri tom, torziona konstante $C_{\alpha\beta}$ su zanemarene u odnosu na konstante istezanja $C_{\alpha\alpha}$.

Ovde su:

v_α -komponente brzine zvuka u tri uzajamno ortogonalna pravca

Dakle, u kristalu sa prostom elementarnom ćelijom sve tri komponente frekvencije zvučnih talasa $\omega_\alpha(k) \rightarrow 0$, kad $k \rightarrow 0$. Kvantno-mehanička pobuđenja sa linearnim zakonom disperzije (1.32) nazivaju se **akustičkim fononima**.

Nešto složeniji slučaj predstavlja linearan niz sa naizmenično raspoređenim atomima mase M_1 i M_2 ($M_1 > M_2$). To je jednodimenzionalni slučaj sa dve podrešetke odnosno elementarna ćelija sadrži dva različita atoma (sl.1.3).



Slika 1.3

Istim postupkom, koristeći uslov (1.28), za frekvencije se dobija:

$$\omega_{\pm}^2 = C \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \pm C \sqrt{\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)^2 - \frac{4 \sin^2(kb)}{M_1 M_2}} \quad (1.33)$$

Zakon disperzije sadrži dve funkcije koje opisuju njihovu zavisnost od talasnog broja (vektora). Analizirajući relaciju (1.33) mogu se izvesti sledeći zaključci.

a) U dugotalasnoj aproksimaciji vodeći članovi u relaciji (1.33) su:

$$\omega_+^2(0) = 2C \frac{M_1 + M_2}{M_1 M_2} \quad (1.34)$$

$$\omega_-^2(k) = 2C \frac{(kl)^2}{M_1 + M_2}$$

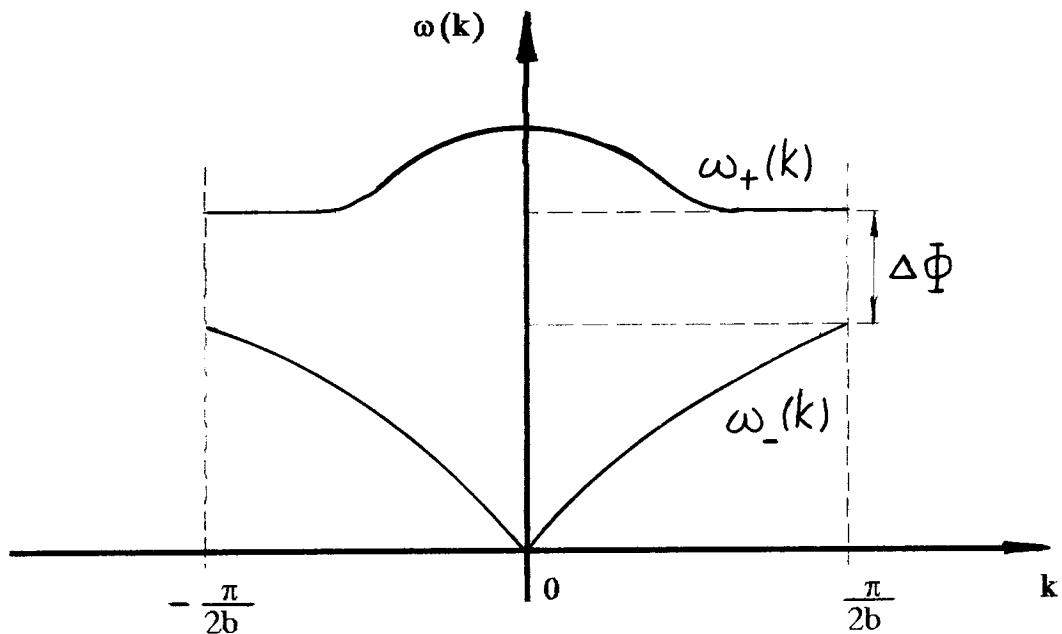
Frekvencije $\omega_+(k)$ nazivaju se optičkim, a $\omega_-(k)$ akustičkim. Za optičko oscilovanje karakteristično je da se atomi kreću jedan nasuprot drugom tako da težište elementarne ćelije miruje. Kod akustičkog rešenja atomi osciluju u fazi.

Porastom talasnog broja $\omega_-(k)$ se povećava, a $\omega_+(k)$ se smanjuje. Na granici prve Briluenove zone biće:

$$\omega_{\pm}^2\left(\frac{\pi}{2b}\right) = C \frac{M_1 + M_2}{M_1 M_2} \left(1 \pm \frac{|M_1 - M_2|}{M_1 + M_2}\right)$$

Kako je $M_1 > M_2$ sledi:

$$\omega_+\left(\frac{\pi}{2b}\right) = \sqrt{\frac{2C}{M_2}} ; \quad \omega_-\left(\frac{\pi}{2b}\right) = \sqrt{\frac{2C}{M_1}} \quad (1.36)$$



Slika 1.4

Zavisnost frekvencije oscilovanja od talasnog broja za linearu dvoatomnu rešetku

Sa ove slike se vidi da fononski spektar poseduje dve grane: akustičku ($\lim_{k \rightarrow 0} \omega_-(k) = 0$) i optičku ($\lim_{k \rightarrow 0} \omega_+(k) \neq 0$ tj. $\lim_{k \rightarrow 0} \omega_+(k) > 0$). Pri tom, maksimalna akustička frekvencija nalazi se ispod minimalne optičke frekvencije. Drugim rečima, u fononskom spektru postoji procep zabranjenih vrednosti, tzv. gap koji razdvaja akustičku i optičku granu. Širina gepa data je izrazom:

$$\Delta\Phi = \sqrt{\frac{2C}{M_1}} \left(\sqrt{\frac{M_1}{M_2}} - 1 \right)$$

Procep će biti uži, što je manja razlika u masama atoma i iščezava u granici $M_2 \rightarrow M_1$. Porastom broja atoma u elementarnoj ćeliji, broj optičkih oscilacija postaje veći, dok je broj akustičkih oscilacija nezavisan od broja atoma u elementarnoj ćeliji jednodimenzionog kristala.

Slično tome, za kristal složene strukture sa σ podrešetki postoji 3σ rešenja za dozvoljene frekvencije. Pri tome tri frekvencije uvek teže nuli kad $\vec{k} \rightarrow 0$ i odgovaraju akustičkim fononima, dok za ostale $3\sigma-3$ važi $\lim_{\vec{k} \rightarrow 0} \omega(\vec{k}) \neq 0$. Ove mehaničke oscilacije odgovaraju optičkim fononima u složenom kristalu.

Pored ovoga mora se napomenuti da vektori $\vec{l}_i(\vec{k})$ koji figurišu u jednačini (1.29) i određuju polarizaciju fononskog talasa, zapravog definišu longitudinalne i transverzalne mehaničke talase. Tako u kristalu čiji atomi osciluju sa tri vrednosti akustičke frekvencije $\omega(\vec{k})$ postoje tri vektora \vec{l} : za jedan od njih važi $\vec{l} \parallel \vec{k}$ i odgovara longitudinalnim zvučnim talasima, dok su preostala dva međusobno normalna i normalna na \vec{k} i odgovaraju transverzalnim zvučnim talasima. Jasno je da talasni vektor \vec{k} definiše pravac prostiranja tog zvuka.

2. FONONI U TANKIM FILMOVIMA

-fononski spektri u deformisanim filmovima

2. FONONI U TANKIM FILMOVIMA

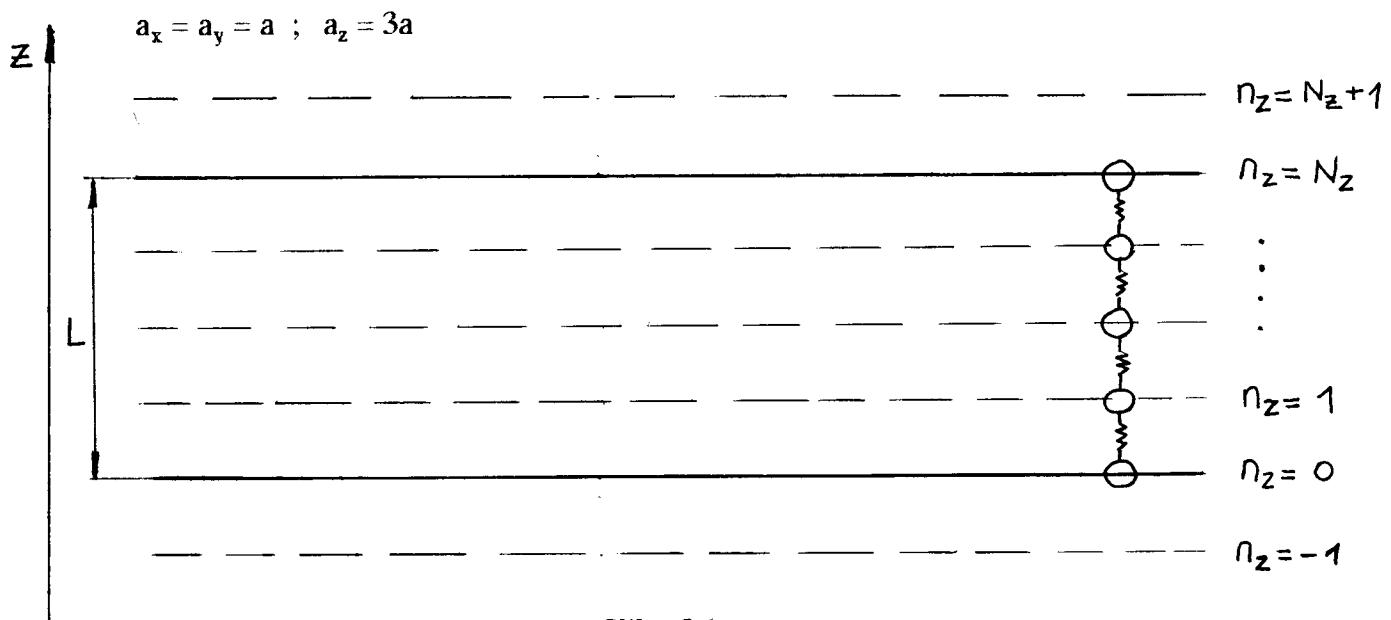
Priroda idealnih kristalnih struktura ne omogućava konstrukciju visokotemperaturnih superprovodnika. Činjenice do kojih se došlo eksperimentalnim proučavanjem keramika, koje su dopirane sitnozrnastim oksidima ukazuju da se fenomen superprovodnosti može realizovati u neidealnim strukturama.

Prisustvo odgovarajućih primesa ili ograničenost strukture u prostoru, što uslovjava narušenje translacione invarijantnosti čini strukturu neidealnom. Struktura konačne debljine, koja ima dve paralelne, beskonačne površine predstavlja film.

Analizom tankih nedeformisanih filmova [2], došlo se do zaključka da se u ovakvim strukturama mogu postići neophodni uslovi za visokotemperaturnu superprovodnost. Kako atomske mase takođe definišu fononske spektre došlo se na ideju da fononski spektri mogu biti izmenjeni adekvatnom distribucijom masa duž jednog pravca. Ove prepostavke čine osnovu teorijskog modela deformisanih filmova. Deformacija se može postići i pogodnim delovanjem spoljašnjeg pritiska na paralelne granične površine.

2.1 Fononski spektri u deformisanim filmovima

Posmatra se tanki film (sl.2.1), "zalepljen" na izotropnu idealnu kristalnu strukturu. Parametri elementarne celije filma su:



Slika 2.1

Film ima konačnu (relativno malu) debljinu L u Z -pravcu, dok je u XY-ravnima beskonačan. Dopingovanjem (spaterovanjem) tankog filma stranim atomima duž Z -pravca, i to sa gornje strane granične površine, dobija se deformisani film. Vršeno je, dakle, asimetrično spaterovanje (samo normalno na graničnu površinu).

Ubačeni atomi obrazuju "grodz", tj. gomilaju se sa gornje strane granične površine u Z -pravcu, a prema donjoj graničnoj površini njihov broj opada. Masa ubačenih atoma je manja od mase atoma osnovne matrice. Pri analizi ovakvog modela

svi važni fizički parametri filma (mase, konstante istezanja, atomski pomeraji, impulsi) postaju zavisni od rešetkinog indeksa $n_z = 0, 1, 2, \dots, N_z$, tj.

$$M_{\vec{n}} \equiv M_{n_x, n_y, n_z} = M_{n_z}$$

$$C_{\alpha\alpha,\vec{n}} \equiv C_{\alpha\alpha,n_x, n_y, n_z} = C_{\alpha\alpha, n_z}$$

Hamiltonian fononskog podsistema u aproksimaciji najbližih suseda ima standardan oblik:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \vec{n}} \frac{(p_{\vec{n}}^{\alpha})^2}{M_{\vec{n}}} + \frac{1}{4} \sum_{\alpha, \vec{n}, \lambda} C_{\alpha\alpha, \vec{n}}^{\alpha\alpha} (u_{\vec{n}}^{\alpha} - u_{\vec{n}-\lambda}^{\alpha})^2 \quad (2.1)$$

Ako se posmatra n -ti atom i njegova dva najbliža suseda, sledi:

$$\sum_{\lambda} [u_{\vec{n}}^{\alpha} - u_{\vec{n}-\lambda}^{\alpha}]^2 = (u_{\vec{n}}^{\alpha} - u_{\vec{n}-1}^{\alpha})^2 + (u_{\vec{n}}^{\alpha} - u_{\vec{n}+1}^{\alpha})^2$$

Hamiltonian dobija oblik:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \vec{n}} \frac{(p_{\vec{n}}^{\alpha})^2}{M_{n_z}} + \frac{1}{4} \sum_{\alpha, \vec{n}} C_{\alpha\alpha, n_z} \left[(u_{\vec{n}}^{\alpha} - u_{\vec{n}-1}^{\alpha})^2 + (u_{\vec{n}}^{\alpha} - u_{\vec{n}+1}^{\alpha})^2 \right] \quad (2.2)$$

Atomi koji pripadaju graničnim površinama, tj. slojevima $n_z = 0$ i $n_z = N_z$ nisu "zamrznuti" u Z -pravcu. Kako su slojevi $n_z = -1$ i $n_z = N_z + 1$, odsutni, to su pomeraji:

$$u_{\alpha, n_x, n_y, -1} = u_{\alpha, n_x, n_y, N_z + 1} = 0 \quad (2.3)$$

S druge strane:

$$C_{\alpha\alpha, -1}, C_{\alpha\alpha, N_z + 1} \neq 0 \quad (2.4)$$

tako da granične površine ne predstavljaju "zidove".

Razvijajući izraz (2.2), sledi:

$$\begin{aligned}
 H = & \frac{1}{4} \sum_{\alpha, n_x, n_y} \left\{ C_{\alpha\alpha, 0} \left[\left(u_{\alpha, n_x, n_y, 0} - u_{\alpha, n_x-1, n_y, 0} \right)^2 + \left(u_{\alpha, n_x, n_y, 0} - u_{\alpha, n_x+1, n_y, 0} \right)^2 + \right. \right. \\
 & \left. \left. + \left(u_{\alpha, n_x, n_y, 0} - u_{\alpha, n_x, n_y-1, 0} \right)^2 + \left(u_{\alpha, n_x, n_y, 0} - u_{\alpha, n_x, n_y+1, 0} \right)^2 + \right. \right. \\
 & \left. \left. + \left(u_{\alpha, n_x, n_y, 0} - u_{\alpha, n_x, n_y, 1} \right)^2 + \left(u_{\alpha, n_x, n_y, 0} - u_{\alpha, n_x, n_y, 0} \right)^2 \right] + \right. \\
 & \left. + C_{\alpha\alpha, N_z} \left[\left(u_{\alpha, n_x, n_y, N_z} - u_{\alpha, n_x-1, n_y, N_z} \right)^2 + \left(u_{\alpha, n_x, n_y, N_z} - u_{\alpha, n_x+1, n_y, N_z} \right)^2 + \left(u_{\alpha, n_x, n_y, N_z} - u_{\alpha, n_x, n_y-1, N_z} \right)^2 + \right. \right. \\
 & \left. \left. + \left(u_{\alpha, n_x, n_y, N_z} - u_{\alpha, n_x, n_y+1, N_z} \right)^2 + \left(u_{\alpha, n_x, n_y, N_z} - u_{\alpha, n_x, n_y, N_z-1} \right)^2 + \left(u_{\alpha, n_x, n_y, N_z} - u_{\alpha, n_x, n_y, N_z} \right)^2 \right] \right\} + \\
 & + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, n_x, n_y, n_z} \frac{(p_{\alpha, n_x, n_y, n_z})^2}{M_{n_z}} + \frac{1}{4} \sum_{n_z=1}^{N_z-1} C_{\alpha\alpha, n_z} \left[\left(u_{\alpha, n_x, n_y, n_z} - u_{\alpha, n_x-1, n_y, n_z} \right)^2 + \right. \\
 & \left. + \left(u_{\alpha, n_x, n_y, n_z} - u_{\alpha, n_x+1, n_y, n_z} \right)^2 + \left(u_{\alpha, n_x, n_y, n_z} - u_{\alpha, n_x, n_y-1, n_z} \right)^2 + \right. \\
 & \left. + \left(u_{\alpha, n_x, n_y, n_z} - u_{\alpha, n_x, n_y+1, n_z} \right)^2 + \left(u_{\alpha, n_x, n_y, n_z} - u_{\alpha, n_x, n_y, n_z-1} \right)^2 + \left(u_{\alpha, n_x, n_y, n_z} - u_{\alpha, n_x, n_y, n_z+1} \right)^2 \right] \quad (2.5)
 \end{aligned}$$

Da bi se dobile jednačine za fononske pomeraje, potrebno je koristiti Hajzenbergove jednačine kretanja:

$$i\hbar \dot{u}_{\beta, m_x, m_y, m_z} = [u_{\beta, m_x, m_y, m_z}, H] \quad (2.6)$$

$$i\hbar \dot{p}_{\beta, m_x, m_y, m_z} = [p_{\beta, m_x, m_y, m_z}, H] \quad (2.7)$$

Koristeći komutacione relacije:

$$[u_{\bar{n}}^{\alpha}, p_{\bar{m}}^{\beta}] = i\hbar \delta_{\bar{n}\bar{m}} \delta_{\alpha\beta}$$

$$[u_{\bar{n}}^{\alpha}, u_{\bar{m}}^{\beta}] = [p_{\bar{n}}^{\alpha}, p_{\bar{m}}^{\beta}] = 0$$

računaju se komutatori $[u_{\beta, m_x, m_y, m_z}, H]$ i $[p_{\beta, m_x, m_y, m_z}, H]$ i dobija se:

$$[u_{\beta, m_x, m_y, m_z}, H] = \frac{i\hbar}{M_{m_z}} p_{\beta, m_x, m_y, m_z} \quad (2.8)$$

$$\begin{aligned} [p_{\beta, m_x, m_y, m_z}, H] &= i\hbar \left[C_{\beta\beta, m_z} (u_{\beta, m_x-1, m_y, m_z} + u_{\beta, m_x+1, m_y, m_z} + \right. \\ &\quad + \frac{C_{\beta\beta, m_z}}{2} (u_{\beta, m_x, m_y, m_z-1} + u_{\beta, m_x, m_y, m_z+1} - 2u_{\beta, m_x, m_y, m_z}) + \\ &\quad + \frac{C_{\beta\beta, m_z+1}}{2} (u_{\beta, m_x, m_y, m_z+1} + u_{\beta, m_x, m_y, m_z}) + \\ &\quad \left. + \frac{C_{\beta\beta, m_z-1}}{2} (u_{\beta, m_x, m_y, m_z-1} + u_{\beta, m_x, m_y, m_z}) \right] \end{aligned} \quad (2.9)$$

Na osnovu toga sledi:

$$\dot{u}_{\beta, m_x, m_y, m_z} = \frac{1}{M_{m_z}} p_{\beta, m_x, m_y, m_z} \quad (2.10)$$

Diferenciranjem relacije (2.10) po vremenu dobiće se:

$$\ddot{u}_{\beta, m_x, m_y, m_z} = \frac{1}{M_{m_z}} \dot{p}_{\beta, m_x, m_y, m_z} = \frac{1}{i\hbar M_{m_z}} [p_{\beta, m_x, m_y, m_z}, H] \quad (2.11)$$

Kombinacijom relacija (2.9) i (2.11) dobija se diferencijalno-diferencna jednačina oblika:

$$\begin{aligned}
 \ddot{u}_{\beta,m_x,m_y,m_z} = & \frac{C_{\beta\beta,m_z}}{M_{m_z}} (u_{\beta,m_x+1,m_y,m_z} + u_{\beta,m_x-1,m_y,m_z} - 2u_{\beta,m_x,m_y,m_z} + \\
 & + u_{\beta,m_x,m_y+1,m_z} + u_{\beta,m_x,m_y-1,m_z} - 2u_{\beta,m_x,m_y,m_z}) + \\
 & + \frac{C_{\beta\beta,m_z}}{2M_{m_z}} (u_{\beta,m_x,m_y,m_z+1} + u_{\beta,m_x,m_y,m_z-1} - 2u_{\beta,m_x,m_y,m_z}) + \\
 & + \frac{C_{\beta\beta,m_z+1}}{2M_{m_z}} (u_{\beta,m_x,m_y,m_z+1} - u_{\beta,m_x,m_y,m_z}) + \\
 & + \frac{C_{\beta\beta,m_z-1}}{2M_{m_z}} (u_{\beta,m_x,m_y,m_z-1} - u_{\beta,m_x,m_y,m_z})
 \end{aligned} \tag{2.12}$$

Kako se translaciona invarijantnost održava po svim XY-ravnima, to će se rešenje (2.12) tražiti u obliku proizvoda nepoznate funkcije (duž Z-pravca) i harmonijske funkcije položaja XY-ravnima (delimičan Furije razvoj), tj.:

$$u_{\beta,m_x,m_y,m_z} = \sum_{k_x,k_y} \Phi_{\beta,m_z} e^{ia(k_x m_x + k_y m_y) - i\omega t}$$

Diferenciranjem po vremenu ovog izraza i uvrštavanjem u jednačinu (2.12) dobija se diferencna jednačina za amplitudu Φ_{α,n_z} , za $n_z = 1, 2, \dots, N_z - 1$ (pri tom se vrše prelazi $\beta \rightarrow \alpha$; $m_x, m_y, m_z \rightarrow n_x, n_y, n_z$):

$$\begin{aligned}
 \Phi_{\alpha,n_z} \left\{ \frac{4C_{\alpha\alpha,n_z}}{M_{m_z}} \left[\sin^2\left(\frac{ak_x}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{ak_y}{2}\right) \right] - \omega^2 \right\} = \\
 = \frac{C_{\alpha\alpha,n_z}}{2M_{n_z}} (\Phi_{\alpha,n_z+1} + \Phi_{\alpha,n_z-1} - 2\Phi_{\alpha,n_z}) + \\
 + \frac{C_{\alpha\alpha,n_z+1}}{2M_{n_z}} (\Phi_{\alpha,n_z+1} - \Phi_{\alpha,n_z}) + \frac{C_{\alpha\alpha,n_z-1}}{2M_{n_z}} (\Phi_{\alpha,n_z-1} - \Phi_{\alpha,n_z})
 \end{aligned} \tag{2.13}$$

Za slojeve $n_z = 0$ i $n_z = N_z$, uzimajući u obzir relacije (2.3) i (2.4), dobijaju se granične jednačine:

$$2\Phi_{\alpha,0} \left\{ \omega^2 M_0 - 4C_{\alpha\alpha,0} \left[\sin^2\left(\frac{ak_x}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{ak_y}{2}\right) \right] \right\} + \\ + C_{\alpha\alpha,0} (\Phi_{\alpha,1} - 2\Phi_{\alpha,0}) + C_{\alpha\alpha,1} (\Phi_{\alpha,1} - \Phi_{\alpha,0}) - C_{\alpha\alpha,-1} \Phi_{\alpha,0} = 0 \quad (2.14)$$

$$2\Phi_{\alpha,N_z} \left\{ \omega^2 M_{N_z} - 4C_{\alpha\alpha,N_z} \left[\sin^2\left(\frac{ak_x}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{ak_y}{2}\right) \right] \right\} + \\ + C_{\alpha\alpha,N_z} (\Phi_{\alpha,N_z-1} - 2\Phi_{\alpha,N_z}) + C_{\alpha\alpha,N_z-1} (\Phi_{\alpha,N_z-1} - \Phi_{\alpha,N_z}) - \\ - C_{\alpha\alpha,N_z+1} \Phi_{\alpha,N_z} = 0 \quad (2.15)$$

Jednačine (2.13), (2.14) i (2.15) predstavljaju homogen sistem od $N_z + 1$ diferencnih jednačina.

Postupak određivanja dozvoljenih fononskih stanja na osnovu ovog sistema je vrlo složen. Iz tog razloga se kontinualnom aproksimacijom izvrši prelaz sa diskretnih na kontinualne promenljive i odgovarajuće veličine se razvijaju u red.

$$n_z \rightarrow z; \quad \Phi_{\alpha,n_z} \rightarrow \Phi_\alpha(z); \quad M_{n_z} \rightarrow M(z); \quad C_{\alpha\alpha,n_z} \rightarrow C_\alpha(z) \quad (2.16)$$

U istom cilju uvodi se i aproksimacija malih talasa ($\vec{k} \rightarrow 0$), pa je:

$$\sin^2\left(\frac{ak_x}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{ak_y}{2}\right) \approx \frac{a^2 k^2}{4}; \quad k^2 = k_x^2 + k_y^2 \quad (2.17)$$

U Tajlorov red razvijaju se veličine:

$$\Phi_{\alpha,n_z \pm 1} = \Phi_\alpha(z \pm a_z) = \Phi_\alpha(z) \mp a_z \frac{d\Phi_\alpha(z)}{dz} + \frac{a_z^2}{2} \frac{d^2\Phi_\alpha(z)}{dz^2} \mp \dots$$

$$C_{\alpha,n_z \pm 1} = C_\alpha(z \pm a_z) = C_\alpha(z) \mp a_z \frac{dC_\alpha(z)}{dz} + \dots$$

Nakon prelaska na kontinuum, zamenom diskretnih veličina kontinualnim i ubacivanjem u diferencnu jednačinu (2.13) ona prelazi u diferencijalnu jednačinu drugog reda:

$$\frac{d^2\Phi_\alpha(z)}{dz^2} + \frac{1}{C_\alpha(z)} \frac{d\Phi_\alpha(z)}{dz} \frac{dC_\alpha(z)}{dz} - \left[\frac{a_z^2 k^2}{a_z^2} - \frac{M(z)}{C_\alpha(z)a_z^2} \omega^2 \right] \Phi_\alpha(z) = 0 \quad (2.18)$$

Već je rečeno da se masa osnovne matrice mora zameniti redukovanim masom, pa je:

$$\frac{1}{M(z)} = \frac{1}{\mu_m} + \frac{n(z)}{\mu_s}$$

gde su:

μ_m - masa osnovne matrice

μ_s - masa spaterovanih atoma

$n(z)$ - broj spaterovanih atoma na mestu z

U okviru već izložene slike ovog modela može se pretpostaviti da se spaterovanjem stranih atoma u osnovnu matricu, duž Z -pravca, uspostavlja parabolična deformacija redukovane mase, što je dato izrazom:

$$M(z) = A + B(z - L)^2 \quad (2.19)$$

gde A i B predstavljaju konstante koje treba odrediti na osnovu graničnih uslova. Kako je redukovana masa najmanja na gornjoj graničnoj površini ($z=L$), dok je na donjoj graničnoj površini ($z=0$) jednaka masi osnovne matrice μ_m , to funkcija (2.19) mora zadovoljavati sledeće granične uslove:

$$M(0) = \mu_m$$

$$M(L) = \frac{\mu_m \mu_s}{\mu_s + n \mu_m}$$

Određivanjem konstanti A i B pomoću ovih graničnih uslova, dobija se sledeći izraz za distribuciju mase:

$$M(z) = \mu_m \left[1 - \rho_M^{-1} \frac{z}{L} \left(2 - \frac{z}{L} \right) \right] \quad (2.20)$$

gde je:

$$\rho_M = 1 + \frac{\mu_s}{n \mu_m}$$

a n predstavlja broj ubačenih stranih atoma između slojeva $N_{z-1} - 1$ i N_z .

Usled nagomilavanja ubačenih atoma duž Z-pravca, konstanta rešetke a_z se takođe parabolički deformiše na sledeći način:

$$a(z) = D + F(z - L)^2 \quad D, F = \text{const} \quad (2.21)$$

Granični uslovi koje prethodna funkcija mora zadovoljavati su:

$$a(0) = a_z$$

$$a(L) = \frac{a_z}{n}$$

gde je a_z međuatomsko rastojanje duž Z-pravca za nespaterovanu matricu.

Pomoću ovih graničnih uslova određuju se konstante D i F tako da funkcija (2.21) dobija oblik:

$$a(z) = a_z \left[1 - \frac{n-1}{n} \frac{z}{L} \left(2 - \frac{z}{L} \right) \right] \quad (2.22)$$

Kako potencijal opada sa porastom rastojanja između atoma, to je veza između konstante istezanja $C_\alpha(z)$ matrice u Z-pravcu i međuatomskog rastojanja $a(z)$, data na sledeći način:

$$C_\alpha(z) = \frac{\text{const}}{a^p(z)}$$

gde p označava stepen sa kojim međuatomski potencijali opadaju sa rastojanjem. Uvrštavajući relaciju (2.22) u prethodni izraz dobija se:

$$C_\alpha(z) = C_z \left[1 - \frac{n-1}{n} \frac{z}{L} \left(2 - \frac{z}{L} \right) \right]^{-p} \quad (2.23)$$

gde je C_z konstanta istezanja za nespaterovanu matricu duž Z-pravca.

Za velike vrednosti p izraz u zagradi relacije (2.23) se može razviti u red. Ovaj red se može aproksimirati sa prva dva člana razvoja:

$$\left[1 - \frac{n-1}{n} \frac{z}{L} (2 - \frac{z}{L})\right]^{-p} \approx 1 + p \frac{n-1}{n} \frac{z}{L} (2 - \frac{z}{L})$$

tako da se relacija (2.23) može napisati u obliku:

$$C_\alpha(z) = C_z \left(1 + p \frac{n-1}{n} \frac{z}{L} (2 - \frac{z}{L})\right) \quad (2.24)$$

U daljem toku analize, umesto $a(z)$ i $C_\alpha(z)$ biće korištene njihove usrednjene vrednosti. Usrednjavanje po debljini L filma se vrši na sledeći način:

$$\bar{a} \equiv \bar{a}(z) = \frac{1}{L} \int_0^L a(z) dz$$

$$\bar{C} \equiv \bar{C}_\alpha(z) = \frac{1}{L} \int_0^L C(z) dz$$

Za usrednjene vrednosti se dobijaju sledeći izrazi:

$$\bar{a} = a_z \frac{n+2}{3n}$$

$$\bar{C} = C_z \left(1 + \frac{n-1}{3n} 2p\right) \quad (2.25)$$

Dobijene prethodne vrednosti se koriste pri rešavanju diferencijalne jednačine (2.18) tako što:

$$a(z) \rightarrow \bar{a}$$

$$C_\alpha(z) \rightarrow \bar{C} \quad (2.26)$$

Da bi se jednačina (2.18) mogla rešiti uvodi se smena:

$$1 - \frac{z}{L} = \lambda \xi \quad (2.27)$$

gde je λ parametar koji se koristi za simetrizaciju jednačine (2.18). Na osnova toga je:

$$\frac{d}{dz} = -\frac{1}{L\lambda} \frac{d}{d\xi}$$

$$\frac{d^2}{dz^2} = \frac{1}{(L\lambda)^2} \frac{d^2}{d\xi^2} \quad (2.28)$$

Koristeći izraze (2.26) i (2.28) diferencijalna jednačina (2.18) dobija oblik:

$$\frac{d^2\Phi}{d\xi^2} + \left(\frac{L^2\lambda^2\omega^2}{\bar{a}^2\bar{c}} \frac{\mu_m}{\rho_M} (\rho_M - 1) + \lambda^4 \frac{L^2\omega^2}{\bar{a}^2\bar{c}} \frac{\mu_m}{\rho_M} \xi^2 - \frac{L^2\lambda^2}{\bar{a}^2} a^2 k^2 \right) \Phi = 0$$

pri čemu se uzima da je:

$$\lambda^4 \frac{L^2\omega^2}{\bar{a}^2\bar{c}} \frac{\mu_m}{\rho_M} = 1$$

Na osnovu toga sledi:

$$\lambda = \sqrt{\frac{\bar{a}}{L\omega}} \Omega$$

gde je:

$$\Omega = \sqrt{\frac{C\rho_M}{\mu_m}}$$

Nakon izvršenih transformacija dobija se Ermit-Veberova jednačina:

$$\frac{d^2\Phi}{d\xi^2} + (Q(\omega) - \xi^2) \Phi = 0 \quad (2.29)$$

gde je:

$$Q(\omega) = \frac{L}{\bar{a}} \left(\frac{1}{\Omega} (\rho_M - 1) \omega - \frac{\Omega q^2}{\omega} \right); \quad q = ak$$

Rešenje (2.29) ima oblik:

$$\Phi_s^\alpha(\xi) = AH_s(\xi)e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \quad (2.30)$$

Da bi ova rešenja konvergirala, potrebno je da $Q(\omega)$ zadovoljava sledeći uslov:

$$Q(\omega) = 2s+1 ; s=0,1,2,\dots$$

Ovaj uslov obezbeđuje fizičku stabilnost film-strukture proizvoljne debljine, što dovodi do sledećeg izraza za oscilatorne frekvencije sistema:

$$\omega_s(q) = \frac{1}{2} \frac{\Omega \bar{a}}{L} \frac{2s+1}{\rho_M - 1} \left[1 + \sqrt{1 + \left[\frac{2Lq}{(2s+1)\bar{a}} \right]^2 (\rho_M - 1)} \right] \quad (2.31)$$

Dakle, dobijen je zakon disperzije iz kojeg se vidi da nijedna od frekvencija $\omega_s(q)$ ne teži nuli kad $q \rightarrow 0$.

S obzirom na prisustvo granica, jednačina (2.29) mora biti dopunjena dvema graničnim jednačinama (2.14) i (2.15) u kontinualnoj aproksimaciji. Koristeći (2.16), (2.17), (2.27) i (2.30) dobija se granična jednačina za $z=0$:

$$H_s \left[\frac{1}{\lambda} \right] \left(2 - \frac{\rho_M \omega_s^2}{\Omega^2} \right) = H_s \left[\frac{1}{\lambda} \left(1 - \frac{\bar{a}}{L} \right) \right] e^{\frac{\omega_s}{2\Omega} (2 - \frac{\bar{a}}{L})} \quad (2.32)$$

pri čemu je:

$$\bar{C} = C_{\alpha,0} = C_{\alpha,1} = C_{\alpha,-1} ; q = 0$$

Analognim postupkom dolazi se do granične jednačine za $z=L$:

$$H_s[0] \left[2 - \frac{\omega_s^2}{\Omega^2} (\rho_M - 1) \right] = H_s \left[\frac{\bar{a}}{\lambda L} \right] e^{-\frac{\omega_s \bar{a}}{2\Omega L}} \quad (2.33)$$

gde je:

$$\bar{C} = C_{\alpha,N_z} = C_{\alpha,N_z+1} = C_{\alpha,N_z-1} ; q = 0$$

Korištenjem relacije $H_s(x + c) = H_s(x) + (2c)^s$ (*) može se napisati:

$$H_s\left[\frac{1}{\lambda}\left(1 - \frac{\bar{a}}{\lambda}\right)\right] = (-1)^s H_s\left[\frac{\bar{a}}{\lambda L}\right] + \left(\frac{2}{\lambda}\right)^s$$

Jednačina (2.32), korištenjem prethodne relacije dobija oblik:

$$H_s\left(\frac{1}{\lambda}\right)\left(2 - \frac{\rho_M \omega_s^2}{\Omega^2}\right) - \left(\frac{2}{\lambda}\right)^s e^{\frac{\omega_s}{2\Omega}(2 - \frac{\bar{a}}{L})} = (-1)^s H_s\left(\frac{\bar{a}}{\lambda L}\right) e^{\frac{\omega_s}{2\Omega}(2 - \frac{\bar{a}}{L})} \quad (2.34)$$

Kombinovanjem (2.33) i (2.34) dobija se jednačina:

$$\left(2 - \frac{\omega_s^2 \rho_M}{\Omega^2}\right)\left(H_s\left(\frac{1}{\lambda}\right) - (-1)^s H_s(0) e^{\frac{\omega_s}{\Omega}}\right) = \left(\frac{\omega_s^2}{\Omega^2} H_s(0)(-1)^s + \left(\frac{1}{\lambda}\right)^s e^{-\frac{\omega_s \bar{a}}{2\Omega L}}\right) e^{\frac{\omega_s}{\Omega}} \quad (2.35)$$

Odatle se vidi da parametri μ_m, μ_s, n, L i kvantni broj s nisu međusobno nezavisni. Oni u suštini, za date vrednosti definišu uslove egzistencije fononskih stanja sa energijama (2.31)-definišu dozvoljene vrednosti za s odnosno ω_s .

Iz jednačine (2.35) treba zaključiti za koju vrednost kvantnog broja s funkcija $\omega_s(0)$ ima minimalnu vrednost. Pri tom se u ovu jednačinu uvrštavaju minimalne vrednosti funkcija:

$$\Omega_{\min} = (\rho_M G)^{\frac{1}{2}} \frac{V_o}{a_o} 10^{12}$$

$$\lambda_{\min} = \sqrt{\frac{\bar{a}}{L} \frac{\Omega_{\min}}{\omega_s(0)}}$$

gde je:

$$G = 1 + \frac{n-1}{3n} 2p$$

$$\sqrt{\frac{C}{\mu_m}} = \frac{v_z}{a_z}$$

* videti dodatak

pri čemu je:

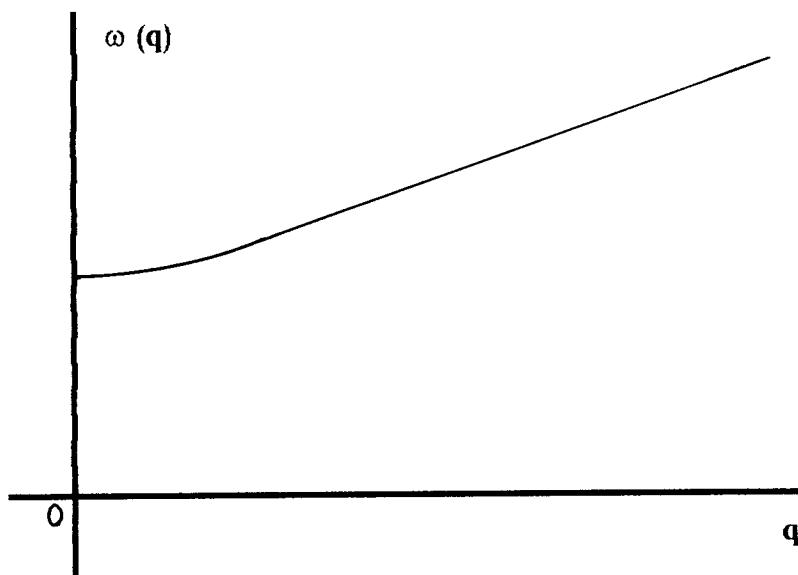
$$v_z = v_o 10^5 \frac{\text{cm}}{\text{s}}$$

$$a_z = a_o 10^{-7} \text{ cm}$$

Parametri n i N_z uzimaju vrednost 3, a $\rho_M = \frac{1}{0.83}$; $p=12$ (za strukturu: $\text{La}(\text{Ba}_{2-x}\text{La}_x)\text{Cu}_3\text{O}_{7+\delta}$ sa $x=0.125$ i $\delta=0.11$, $v_o=3$, $a_o \approx 1.2$).

Grafičko-numeričkim rešavanjem se dobija rešenje za $s_{\min} = 2$.

Grafički prikaz zakona disperzije (2.31) za konkretnе vrednosti pomenute strukture dat je na slici:



Slika 2.2

Sa grafika se vidi da ni jedna od frekvencija ω_2 ne teži nuli kad $k \rightarrow 0$ (odnosno $q \rightarrow 0$), što znači da masena deformacija, parabolickog tipa (2.20) ne dopušta pojavu akustičkih fononskih grana.

Numerička vrednost širine gepa, očitana sa grafika je:

$$\omega_2^{\min} = 1.875 \frac{v_o}{a_o} 10^{12}$$

Na osnovu toga aktivaciona temperatura se računa pomoću izraza:

$$T_{ac} = \frac{\hbar\omega_2^{\min}}{k_B}$$

i iznosi $T_{ac} \approx 35$ K.

ZAKLJUČAK

U ovom radu proučavaju se fononski spektri i stanja u tankim filmovima sa narušenom translacionom simetrijom duž privilegovanog pravca. Narušenje se ogleda u postojanju dveju granica sa paraboličkom distribucijom mase duž tog pravca. Cilj je bio ispitati da li se ovakvom deformacijom mogu postići uslovi za nastanak visokotemperaturne superprovodnosti. Sprovedenom analizom fononskog podsistema u ovakvim strukturama došlo se do sledećih bitnih zaključaka.

- 1) Mehaničke oscilacije u idealnoj (beskonačnoj) kristalnoj strukturi su ravni talasi u svim prvcima, dok u tankim filmovima predstavljaju spoj stojećih talasa u Z-pravcu (koji je normalan na granične površine) i ravnih talasa XY-ravni. Ovaj efekat ukazuje na kolektivno svojstvo fonona duž Z-pravca.
- 2) Sve tri frekvencije u idealnim strukturama teže nuli kad $k \rightarrow 0$ dok u tankim deformisanim filmovima teže nekoj minimalnoj vrednosti duž privilegovanog pravca. One zavise od debljine filma tj. opadaju sa povećanjem debljine.
- 3) Fononi u tankim strukturama poseduju energetski gep, što znači da su to fononi optičkog tipa. Za njihovo pobuđenje je potrebno uložiti odgovarajuću energiju. Dakle, da bi se u strukturi pojavili fononi nju je potrebno zagrejati do temperature aktivacije. Do te temperature sistem se ponaša kao potpuno zamrznut. Fononski gep pored toga što zavisi od debljine filma, zavisi od rasporeda i vrste spaterovanih atoma duž Z-pravca i načina tog spaterovanja.

Ako u sistemu postoje slobodni nosioci nanelektrisanja oni bi se u ovom slučaju sve do ove temperature mogli kretati bez otpora (idealna električna provodnost). Tek na temperaturama iznad aktivacione moglo bi da dođe do sparivanja elektrona u Kuperove parove (superprovodnost) ili da nastane realan otpor u sistemu.

DODATAK:

Neke relacije između Ermitovih polinoma

Rodrigezova formula:

$$H_s(x) \stackrel{\text{def}}{=} (-1)^s e^{x^2} \frac{d^s}{dx^s} \left(e^{-x^2} \right)$$

Rekurentna relacija:

$$H_s(x+c) = H_s(x) + (2c)^s ; \quad c \equiv \text{const}$$

Dokaz:

$$H_s(x+c) = (-1)^s e^{(x+c)^2} \frac{d^s}{dx^s} \left(e^{-(x+c)^2} \right)$$

$$H_s(x+c) = (-1)^s e^{(x^2+2cx)} \left\{ e^{-2cx} \frac{d^s}{dx^s} \left(e^{-x^2} \right) + e^{-x^2} \frac{d^s}{dx^s} \left(e^{-2cx} \right) \right\} =$$

$$= (-1)^s e^{x^2} \frac{d^s}{dx^s} \left(e^{-x^2} \right) + (-1)^s e^{2cx} \frac{d^s}{dx^s} \left(e^{-2cx} \right)$$

$$\frac{d^s}{dx^s} (e^{-2cx}) = ?$$

$$s=0 \quad \frac{d^0}{dx^0} (e^{-2cx}) = e^{-2cx}$$

$$s=1 \quad \frac{d}{dx} (e^{-2cx}) = -2ce^{-2cx}$$

$$s=2 \quad \frac{d^2}{dx^2} (e^{-2cx}) = 2^2 c^2 e^{-2cx}$$

$$s=s \quad \frac{d^s}{dx^s} (e^{-2cx}) = (-1)^s 2^s c^s e^{-2cx}$$

Uvrštavajući poslednji izraz u izraz za $H_s(x+c)$ dobija se rekurentna veza koju je trebalo dokazati.

LITERATURA:

- [1] B.S. Tošić, *Statistička fizika*, PMF IF, Novi Sad 1978.
- [2] M. Pantić, *Fononska stanja u strukturama sa narušenom simetrijom*, PMF FF, Beograd 1993.
- [3] L.I. Šif, *Kvantna mehanika*, V. Karadžić, Beograd 1986.
- [4] D.S. Mitrinović, D.Ž. Đoković, *Specijalne funkcije*, Građevinska knjiga, Beograd 1964.
- [5] I. Supek, *Teorijska fizika i struktura materije II*, Školska knjiga, Zagreb 1990.
- [6] C. Kitel, *Uvod u fiziku čvrstog stanja*, Savremena administracija, Beograd 1970.
- [7] А.С. Давидов, *Теория твердого тела*, Наука, Москва 1976.
- [8] А.С. Давидов, *Квантовая механика*, Наука, Москва 1973.