

UNIVERZITET U NOVOM SADU  
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET  
INSTITUT ZA FIZIKU

УНИВЕРЗИТЕТ У НОВОМ САДУ  
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ

ПРИМЉЕНО:	- 7 СЕП 2000
ОРГАНИЗ ЈЕД.	БРОЈ
0603	9 / 203

- D I P L O M S K I R A D -

ELEKTRONSKI SPEKTRI  
U PERTURBOVANOJ KVANTNOJ ŽICI

MENTOR  
PROF. DR JOVAN ŠETRAJČIĆ

KANDIDAT  
ANDRIJA MITIĆ

Novi Sad, 2000. godine

## **Sadržaj**

<b>1</b>	<b>Uvod</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Elektroni u kristalima</b>	<b>4</b>
2.1	Model kvazislobodnih elektrona . . . . .	4
2.1.1	Energetske zone . . . . .	4
2.1.2	Brzina, ubrzanje i efektivna masa . . . . .	7
2.1.3	Statistika kvazislobodnih nosilaca . . . . .	8
2.2	Elektroni u neograničenim strukturama . . . . .	9
2.2.1	Elektronski hamiltonijan . . . . .	9
2.2.2	Jednačine kretanja i zakon disperzije . . . . .	9
2.3	Elektroni u film-strukturama . . . . .	11
2.3.1	Modelni hamiltonijan . . . . .	11
2.3.2	Zakon disperzije . . . . .	14
<b>3</b>	<b>Elektroni u kvantnim žicama</b>	<b>15</b>
3.1	Modelni hamiltonijan . . . . .	16
3.2	Jednačina kretanja . . . . .	18
3.3	Zakon disperzije . . . . .	21
<b>4</b>	<b>Zaključak</b>	<b>24</b>
<b>5</b>	<b>Literatura</b>	<b>25</b>

## 1 Uvod

U teoriji kondenzovane materije se najčešće analiziraju strukture koje su prostorno homogene i poseduju osobinu translacione invarijantnosti [1]. Međutim, u praksi idealno čiste strukture ne postoje. Pored toga, kristali poseduju granične površine na kojima dolazi do specifičnih efekata i fizičkih fenomena, a oni se ne mogu direktno objasniti metodama teorije idealnih struktura. Postojanje graničnih površina, pored uticaja nečistoća (primesa, defekata, vakancija i sl.), kod ovih struktura dovodi do narušenja translacione simetrije [2].

Za modernu nauku o materijalima danas je najznačajnije precizno strukturiranje materijala do dimenzija od nekoliko nanometara, posebno na polju elektronike, optoelektronike i visokotemperaturske superprovodnosti [3]. Fenomeni povezani sa tako malim dimenzijama dovode do pojavе novih i drugačijih, odnosno izmenjenih osobina materijala, što je interesantno ne samo sa fundamentalnog fizičkog stanovišta, već su takve strukture i od šireg praktičnog značaja. Kod struktura čiji su dimenzioni parametri reda nekoliko nanometara, tzv. kvantne ili nanostrukture (tanki filmovi, superrešetke, kvantne žice i kvantne tačke), izraženi su *quantum size effects* [4] pa je za njihovo opisivanje potrebno koristiti savremene metode kvantne teorije polja [5,6]. Elektronska struktura kvantnih sistema potpuno se razlikuje od iste kod polaznih (masivnih) uzoraka što ima za posledicu da ove strukture imaju sasvim nove transportne, optičke i magnetne karakteristike.

Ispitivanje elektronskog podsistema, koji, pored fononskog, predstavlja fundamentalni fizički podsistem, je od značaja iz razloga što su upravo (kvazi)slobodna naelektrisanja nosioci svih transportnih i termičkih procesa u fizici kondenzovane materije [1]. U ovom radu istraženi su uticaji granica i perturbacionih parametara na energetski spektar i moguća stanja elektrona (promene u zakonu disperzije) u kristalnim film-strukturama i kvantnim žicama [7,8]. Za analizu je odabran metod dvovremenskih Grinovih funkcija, zbog definicije polova Grinovih funkcija [9]. Naime, realni delovi polova Grinovih funkcija definišu energije elementarnih ekscitacija (pobudjenja) u kristalu, tako da njihovim nalaženjem direktno dobijamo i zakon disperzije elektrona.

## 2 Elektroni u kristalima

Translaciona invarijantnost idealnih kristalnih struktura [1] nameće periodičan (sa periodom kristalne rešetke) oblik mnogim fizičkim veličinama koje ih opisuju (npr. periodična raspodela polja i potencijalne energije elektrona).

Jedan od glavnih zadataka teorije čvrstog stanja je proučavanje promena diskretnog energetskog spektra elektrona izolovanog atoma - pri približavanju atoma i obrazovanju kristalne strukture. U ovom procesu periodično polje kristala i interakcija medju atomima dovodi do cepanja energetskih nivoa elektrona slobodnih atoma. Pošto se kristal može tretirati kao gigantski molekul, to kvantna stanja elektrona u tom molekulu, zbog Paulijevog principa isključenja, moraju biti okarakterisana različitim kvantnim brojevima što ima za posledicu formiranje čitavog spektra energetskih nivoa na mestu jednog nivoa u izolovanom atomu [1,10]. Umesto jednog energetskog nivoa, jednakog za svih  $N$  izolovanih atoma, u čvrstom telu se pojavljuje  $N$  blisko rasporedjenih nivoa, koji obrazuju energetsku zonu. Cepanje energetskih nivoa je najizrazitije za spoljašnje (valentne) nivoe, jer se talasne funkcije spoljašnjih valentnih elektrona susednih atoma međusobno veoma preklapaju, dovodeći do kolektiviziranosti ovih stanja, kojima se na taj način atomi povezuju u kristal - gigantski molekul.

Ovi kolektivizirani elektroni, kojima se inače opisuju najkarakterističnija svojstva metala, nisu vezani sa atomima kristalne rešetke i mogu da se premeštaju po celoj zapremini metala. Međutim, čak i kada elektron napusti atom u kristalu, on se pod dejstvom primjenjenog električnog polja ne kreće slobodno već je podvrgnut uticaju kristalnog polja. Ovaj uticaj se može usrednjeno uzeti u obzir uvodjenjem efektivne mase kvazislobodnih nosilaca nanelektrisanja [1,10]. Takođe, zbog specifičnosti kretanja elektrona u kristalnom polju, anomalnog ponašanja kvazislobodnih elektrona na krajevima valentne zone, uvodi se pojam kvazislobodnih nosilaca nanelektrisanja - šupljina.

### 2.1 Model kvazislobodnih elektrona

Veliki broj važnih fizičkih osobina mogu se razumeti polazeći od modela slobodnih elektrona po kome se najslabije vezani elektroni atoma kreću slobodno po zapremini metala. Valentni elektroni postaju provodnici elektriciteta i nazivaju se provodni elektroni. Sile izmedju provodnih elektrona i jona se zanemaruju, tj. smatra se da se provodni elektroni mogu kretati svuda u unutrašnjosti uzorka. Ukupna energija je jednaka kinetičkoj, što znači da se potencijalna ne uzima u obzir [1,7-10]. Klasična teorija je imala nekoliko uspeha, ali i nedostataka. U uspehe spadaju izvodjenje Omovog zakona ( $\vec{j} = \sigma \vec{E}$ ) i izvodjenje veze izmedju električne i toplotne provodnosti. Međutim, totalni neuspeh je doživelja u objašnjenju toplotnog kapaciteta i paramagnetne susceptibilnosti provodnih elektrona. Zatim, pomoću klasične teorije ne može da se objasni postojanje dugog slobodnog puta elektrona. Pomenute pojave uspešno se opisuju pomoću modela kvazislobodnih elektrona.

#### 2.1.1 Energetske zone

Nalaženje egzaktne kvantitativne teorije predstavlja važan, ali do sada nerešen problem teorije čvrstog stanja. Zato se pribegava odredjenim aproksimacijama, od kojih je jedna aproksimacija kvazislobodnih elektrona u kristalu. Tu se u nultoj aproksimaciji elektron posmatra kao slobodan dok se periodično kristalno polje tretira kao perturbacija (odnosno kao malo narušenje nulte energije).

Dozvoljene vrednosti energije slobodnog elektrona se protežu neprekidno od nula do beskonačno:

$$E = \frac{p^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}, \quad p = \hbar k, \quad k = \frac{2\pi}{\lambda}, \quad (2.1)$$

gde je  $k$  intezitet talasnog vektora slobodnog elektrona. Izraz pokazuje paraboličnu zavisnost izmedju energije i talasnog vektora slobodnog elektrona.

Elektroni ne mogu posedovati sve vrednosti energije u kristalu, tako da iz parabolične krive  $E(k)$  moraju biti isključeni delovi koji odgovaraju zabranjenim zonama. Granice dozvoljenih zona moguće je formalno odrediti posmatranjem difrakcije elektronskih talasa na kristalnim ravnima, koja se ostvaruje shodno Bragovom zakonu:  $n\lambda = 2d \sin \theta$ . Posmatranjem upadnog elektronskog talasa sa pravcem prostiranja normalnim na pomenute kristalne ravni, za slučaj kubne rešetke ( $d = a$ , gde je  $a$  - parametar rešetke) dobija se iz Bragovog zakona  $\lambda = \frac{2a}{n}$ . Ovo je talasna dužina elektronskih talasa koji bivaju reflektovani od kristalnih ravni, odnosno koji se ne mogu prostirati kroz kristal. Ona određuje i vrednosti talasnog vektora koje elektron ne može imati u kristalu:

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{n\pi}{a}, \quad n = \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.2)$$

U okolini zabranjenih vrednosti  $k = \pm \frac{\pi}{a}, \pm \frac{2\pi}{a}, \dots$  zavisnost energije od talasnog vektora  $E(k)$  odstupa od paraboličnog oblika i dolazi do formiranja zabranjenih zona  $\Delta E_1, \Delta E_2, \dots$

Oblasti vrednosti talasnog vektora  $k$  pri kojima se energija elektrona  $E$  menja neprekidno, a na granicama doživljava prekid, nazivaju se Briluenovim zonama. Oblast u  $k$ -prostoru izmedju  $-\frac{\pi}{a}$  i  $+\frac{\pi}{a}$  se naziva prvom Briluenovom zonom. Zbog periodičnosti kristala fizički su neekvivalentne samo tačke recipročnog  $k$ -prostora koje pripadaju prvoj Briluenovoj zoni, dok su fizički ekvivalentne sve vrednosti talasnog vektora  $\vec{k}'$  i  $\vec{k}$  koje se razlikuju za vektor translacije recipročne rešetke  $\vec{K}$ :  $\vec{k}' = \vec{k} + \vec{K}$ , gde  $\vec{k}$  pripada prvoj Briluenovoj zoni. U jednodimenzionom slučaju intenzitet vektora  $\vec{K}$  je celobrojni umnožak intenziteta primitivnog vektora recipročne rešetke [1,7,10], pa se stanja elektrona sa vrednostima talasnog vektora inteziteta  $k$  i talasnih vektora inteziteta  $k'$  ( $\vec{k}' = \vec{k} + n \frac{2\pi}{a}, n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ ) fizički ne razlikuju. To daje mogućnost da se sve Briluenove zone svedu na prvu zonu.

Za kristal konačnih dimenzija Born-Karmanovi ciklični uslovi [1,10] daju diskrete<sup>1</sup> vrednosti kvazitalasnog vektora unutar prve Briluenove zone:

$$k_i = \frac{2\pi}{a_i} \frac{n_i}{N_i}, \quad i = 1, 2, 3, \quad (2.3)$$

gde je  $n_i$  ceo broj. U svakoj dozvoljenoj zoni postoji  $N$  energetskih nivoa ( $N$ -broj atoma u kristalu) koji odgovaraju vrednostima kvazitalasnog vektora u prvoj Briluenovoj zoni:

$$k = \frac{2\pi}{a_i} \frac{n_i}{N_i}, \quad n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \pm \frac{N}{2}, \quad (2.4)$$

rasporedjenih ravnomerno sa medjusobnim razmakom  $\Delta k = \frac{2\pi}{Na}$ . Na svakom od  $N$  nivoa mogu se nalaziti po 2 elektrona sa suprotno orijentisanim spinovima - u zoni kristala može biti najviše  $2N$  elektrona.

<sup>1</sup>U slučaju kristala dovoljno velikih razmara može se smatrati da je  $k_i$  kvazineprekidno [1].

Širina dozvoljene zone se može proceniti pomoću Hajzenbergove relacije neodredjenosti:

$$\Delta E \Delta t \sim \hbar . \quad (2.5)$$

U izolovanom atomu srednje vreme života elektrona u pobudjenom stanju je  $\tau \sim 10^{-8}$  s što za širinu energetskih nivoa daje  $\Delta E \sim 10^{-7}$  eV.

U toku obrazovanja čvrstog tela elektroni se kolektiviziraju prolazeći kroz potencijalne barijere tunel efektom. Prozračnost<sup>2</sup> pravougaone barijere se procenjuje kao [6,10]:

$$D \approx \exp \left( -\frac{2d}{\hbar} \sqrt{2m_e(U_0 - E)} \right) , \quad (2.6)$$

gde su:  $U_0 - E$  - visina barijere koja je za valentne elektrone reda veličine energije ionizacije atoma ( $\sim 10$  eV),  $d$  - širina barijere koja je сразмерна periodu kristalne rešetke ( $\sim 10^{-10}$  m). Ako se brzina elektrona u atomu proceni kao

$$\bar{v} = \sqrt{\frac{2\bar{E}}{m_e}} = \sqrt{\frac{\hbar^2 n^{2/3}}{m_e^2}} \approx 10^6 \frac{\text{m}}{\text{s}} , \quad (2.7)$$

to za jednu sekundu elektron udari  $\frac{\bar{v}}{l}$  puta u barijeru ( $l \sim 10^{-10}$  m - širina potencijalne jame), pa je učestanost prolaska kroz barijeru:

$$f = \frac{\bar{v}}{l} D = \frac{\bar{v}}{l} \exp \left( -\frac{2d}{\hbar} \sqrt{2m_e(U_0 - E)} \right) . \quad (2.8)$$

Srednje vreme pripadanja elektrona datom atomu je

$$\tau = \frac{1}{f} = \frac{l}{\bar{v}} \exp \left( \frac{2d}{\hbar} \sqrt{2m_e(U_0 - E)} \right) \approx 10^{-15} \text{s} , \quad (2.9)$$

tako da se za širinu dozvoljenih zona dobija

$$\Delta E \sim \frac{\hbar}{\tau} \sim 1 \text{eV} . \quad (2.10)$$

Širina unutrašnjih dozvoljenih zona je manja od širine spoljašnjih dozvoljenih zona zbog naglog skoka visine potencijalne barijere. Na osnovu širine dozvoljene zone može se proceniti rastojanje izmedju susednih energetskih nivoa u njoj. U svakoj zoni postoji  $N$  nivoa ( $N \approx 10^{22} \text{cm}^{-3}$ ) tako da je rastojanje izmedju susednih energetskih nivoa u dozvoljenoj zoni reda veličine  $10^{-22}$  eV po  $\text{cm}^3$  materijala.

Širina zabranjenih zona je reda veličine dozvoljenih zona. Pošto više energetske zone imaju veću širinu od nižih, rastojanje izmedju njih je manje dok je za niže zone situacija obrnuta. Energija koju elektroni stiču pod dejstvom spoljašnjeg izvora struje je reda veličine  $10^{-19}$  eV tako da oni veoma lako mogu ostvariti unutarzonske prelaze. Potrebne energije za medjuzonske prelaze su reda veličine nekoliko eV, koje se mogu ostvariti tek pri izuzetno velikoj razlici potencijala ( $U \approx 10$  kV). Dakle, pri dejstvu spoljašnjih činilaca premeštaju se elektroni unutar dozvoljene zone ili oni koji steknu dovoljno energije za medjuzonske prelaze iz valentne u dozvoljenu provodnu zonu.

Prema veličini energetskog procepa materijali se dele na provodne i na neprovodne [10]. Provodni materijali imaju nezauzete energetske nivoe koji leže neposredno iznad zauzetih valentnih nivoa. Postoje dve vrste provodnika:

<sup>2</sup>Relativni odnos propuštenog i upadnog elektronskog fluksa.

- Provodnici prve vrste - kod kojih je valentna zona do pola popunjena.
- Provodnici druge vrste - kod kojih dolazi do prekrivanja valentne i provodne zone.

Neprovodni materijali su oni kod kojih je valentna zona u potpunosti popunjena. Prema veličini energetskog procepa oni se dele na:

- Dielektrike - kod kojih je širina energetskog procepa veća od 3.5 eV.
- Poluprovodnike - kod kojih je širina energetskog procepa manja od 3.5 eV.

### 2.1.2 Brzina, ubrzanje i efektivna masa

Kako kvazislobodni elektroni u metalu čine degenerisan gas, odnosno, podvrgavaju se kvantnoj Fermi-Dirakovojoj statistici, potrebno je napustiti klasičnu predstavu elektrona kao čestice i posmatrati njegovu dualnu (čestično-talasnju) kvantomehaničku prirodu [1,9,10].

Pogodan način prikazivanja elektrona je u vidu talasnog paketa gde je čestični aspekt elektrona izražen njegovom lokalizacijom u intervalu gde je rezultujuća amplituda talasnog paketa različita od nule. Srednja brzina elektrona je odredjena grupnom brzinom talasnog paketa:

$$v = \frac{d\nu}{d(1/\lambda)} = \frac{d\omega}{dk} \implies \vec{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla E(\vec{k}) . \quad (2.11)$$

Sa druge strane, brzina priraštaja energije elektrona, pod dejstvom neke spoljašnje sile  $\vec{F}$ , u kristalu je jednaka:

$$\frac{dE}{dt} = \vec{F} \cdot \vec{v} , \quad (2.12)$$

pa se na osnovu toga dobija izraz za ubrzanje elektrona:

$$\vec{a} \equiv \frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{d}{dt} \left( \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial \vec{k}} \right) = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial \vec{k} \partial \vec{k}} \vec{F} \equiv \frac{\vec{F}}{m^*} , \quad (2.13)$$

gde veličina  $\frac{1}{m^*}$  predstavlja tenzor recipročne efektivne mase:

$$\left( \frac{1}{m^*} \right)_{\alpha\beta} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial \vec{k}_\alpha \partial \vec{k}_\beta} ; \quad \alpha, \beta = x, y, z . \quad (2.14)$$

Posebno je interesantna primitivna kubna rešetka kod koje se uslov da vektor  $\vec{k}$  pripada redukovanim području svodi na

$$-\frac{\pi}{a} < k_\alpha < \frac{\pi}{a} \quad \alpha = x, y, z . \quad (2.15)$$

Za ovakvu rešetku tenzor recipročne efektivne mase je simetričan i ima medjusobno jednake dijagonalne komponente. Ukoliko se ta osobina tenzora primeni na izraz (2.13), odnosno (2.1), dobija se zakon disperzije istog oblika kao i kod slobodnog elektrona, ali sa efektivnom masom  $m^*$ :

$$E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} . \quad (2.16)$$

Smisao uvodjenja efektivne mase sastoji se u tome da se složeni zakoni kretanja u kristalu mogu formalno svesti na zakone klasične fizike. Znači, posredstvom efektivne mase je uračunato rezultujuće dejstvo periodičnog električnog polja kristalne rešetke na jedan kvazislobodan elektron.

Zavisno od zakrivljenosti energetske površine, efektivna masa može da bude negativna ili pozitivna (što odgovara elektronima ili šupljinama, respektivno). Ubrzanje nosioca naelektrisanja u kristalnoj rešetki odredjeno je, ne slobodnom elektronskom masom, već skupom veličina (2.14) koje se menjaju pomeranjem elektronskog stanja u prostoru talasnog vektora. Efektivna masa elementarnih nosioca naelektrisanja je pozitivna oko sredine, a negativna pri kraju redukovanih područja.

Ove anomalne oblasti ( $m^* < 0$ ) mogu da se objasne posmatrajući kretanje elektrona pod dejstvom konstantnog spoljašnjeg električnog polja  $\vec{E}$ . Ako je pre uključenja polja  $\vec{E}$  njegova energija bila jednaka nuli (tj. nalazi se u centru Briluenove zone), posle priključenja  $\vec{E}$ , na elektron počinje da deluje konstantna sila  $-e\vec{E}$ , pa kvaziimpuls elektrona linearno raste sa vremenom. Svaki put kada elektron dostigne granicu Briluenove zone  $k = +\pi/a$  njegov kvaziimpuls se skokovito menja u suprotni ( $k = -\pi/a$ ). Takvu skokovitu promenu doživljava i brzina elektrona: pozitivnim vrednostima brzine odgovara kretanje elektrona u pravcu delovanja sile, a negativnim nasuprot delovanju te sile. Dakle, kretanje elektrona u kristalu ima oscilatorni karakter. Oblasti negativne mase odgovaraju situaciji da se elektron usporava iako na njega deluje spoljašnja sila sa težnjom da mu poveća brzinu ( $k' < k < \pi/a$ ), odnosno ubrzava iako spoljašnja sila teži da mu smanji brzinu ( $-\pi/a < k < -k'$ ). Medutim, u toj oblasti faznog  $\vec{k}$ -prostora negativno naelektrisani elektron negativne mase, može da se tretira kao pozitivno naelektrisana čestica pozitivne mase - šupljina koja se kreće u skladu sa delovanjem polja  $+e\vec{E}$ . Prema tome, vidi se da se stanje u zoni može opisati prisustvom kvazičestice koja poseduje istu količinu naelektrisanja kao i elektron, samo suprotnog predznaka. Tim kvazičesticama pripisani su talasni vektori nezauzetih kvantnih stanja, pa se nazivaju šupljinama. Njihov smer kretanja u spoljašnjem polju je suprotan od smera kretanja elektrona. Promena predznaka naelektrisanja ne utiče na izraz za ubrzanje ako se istovremeno promeni i predznak efektivne mase. Kako je masa elektrona pri vrhu zone negativna, efektivna masa šupljina je pozitivna. Znači, šupljine su kvazičestice pozitivnog naelektrisanja i pozitivne mase. Dakle, kretanje elektrona na krajevima zona može da se posmatra i kao kretanje pozitivno naelektrisanih šupljina [10].

### 2.1.3 Statistika kvazislobodnih nosilaca

Raspodela elektrona u kristalu po energijama, pri nekoj temperaturi  $T$ , pokorava se Fermi-Dirakovoj statistici [9,10]:

$$f_e(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1}, \quad (2.17)$$

gde  $f_e(E)$ - predstavlja verovatnoću da je energetski nivo sa energijom  $E$  zauzet. Popunjavanje nivoa vrši se prema Paulijevom principu. Kao posledica toga pri nultoj temperaturi svi nivoi do nekog odredjenog su popunjeni sa po 2 elektrona, a svi nivoi iznad pomenutog su prazni. Najviši popunjeni nivo pri  $T = 0$  se naziva Fermijev nivo, a energija koja odgovara tom nivou naziva se Fermijeva energija  $E_F$ . Svi nivoi viši od Fermijevog su prazni, tako da funkcija raspodele na apsolutnoj nuli, ima vrednost:

$$f_e(E) = \begin{cases} 1 & E < E_F \\ 0 & E > E_F \end{cases}$$

Temperatura pridružena Fermijevoj energiji naziva se temperatura degeneracije. Elektronski gas je degenerisan u području gde važi:  $T \leq T_F$ . Sa porastom temperature jedan deo elektrona se pobudi i prelazi na više energetske nivoje. Verovatnoća nalaženja elektrona na nižim nivoima  $E < E_F$  se smanji, ali se za isto toliko poveća verovatnoća nalaženja elektrona na višim nivoima

$E > E_F$ . Granica popunjenoosti se rasplinjava za veličinu  $k_B T$ . Za sve temperature iznad apsolutne nule uvek važi  $f(E_F) = \frac{1}{2}$ .

Verovatnoća nalaženja šupljina na nekom energetskom nivou jednaka je verovatnoći ne-nalaženja elektrona na tom nivou:  $f_p = 1 - f_e$ .

Pri vrlo visokoj temperaturi Fermi-Dirakova statistika prelazi u Bolcmanovu, i elektronski (šupljinski) gas se ponaša kao klasičan gas.

## 2.2 Elektroni u neograničenim strukturama

Ovde će se naći elektronski zakon disperzije metodom Grinovih funkcija.

### 2.2.1 Elektronski hamiltonijan

Sada će se razmotriti neka svojstva elektronskog podsistema idealnog beskonačnog kubnog kristala polazeći od hamiltonijana kvazislobodnih elektrona koji u konfiguracionom prostoru i harmonijskoj aproksimaciji ima oblik [7,9]:

$$H = \sum_{\vec{n}} \Delta_{\vec{n}} a_{\vec{n}}^+ a_{\vec{n}} - \sum_{\vec{n}, \vec{m}} W_{\vec{n}, \vec{m}} a_{\vec{n}}^+ a_{\vec{m}}, \quad (2.18)$$

gde su  $a_{\vec{n}}^+$  i  $a_{\vec{n}}$  - kreacioni i anihilacioni operatori elektrona na čvoru  $\vec{n}$  rešetke. Veličina  $\Delta_{\vec{n}}$  - predstavlja energiju elektrona lokalizovanog na čvoru  $\vec{n}$ , a veličine  $W_{\vec{n}, \vec{m}}$  - su matrični elementi elektronskog transfera sa čvora  $\vec{n}$  na čvor  $\vec{m}$ . Ovde je pretpostavljeno da je broj elektrona po atomu relativno mali (jedan elektron po atomu) tako da se Kulonova interakcija elektrona može zanemariti. U tom slučaju, lako se pokazuje da je hamiltonijan (2.18) ekvivalentan hamiltonijanu elektronskog gasa u aproksimaciji efektivne mase:

$$H = \sum_{\vec{k}} E_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}}, \quad E_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2 m^*}. \quad (2.19)$$

Translaciona invarijantnost posmatranog idealnog kristala nameće periodičnost hamiltonijana (2.18) koja ima za posledicu da su:

$$\Delta_{\vec{n}} = \Delta, \quad W_{\vec{n}, \vec{m}} = W_{\vec{m}, \vec{n}} \equiv W; \quad \forall (\vec{n}, \vec{m}) \quad (2.20)$$

Na osnovu toga, u aproksimaciji najблиžih suseda, elektronski hamiltonijan postaje:

$$\begin{aligned} H = & \Delta \sum_{n_x n_y n_z} a_{n_x n_y n_z}^+ a_{n_x n_y n_z} - W \sum_{n_x n_y n_z} a_{n_x n_y n_z}^+ (a_{n_x+1, n_y n_z} + a_{n_x-1, n_y n_z} + \\ & + a_{n_x n_y+1, n_z} + a_{n_x n_y-1, n_z} + a_{n_x n_y n_z+1} + a_{n_x n_y n_z-1}). \end{aligned} \quad (2.21)$$

### 2.2.2 Jednačine kretanja i zakon disperzije

Svojstva posmatranog elektronskog sistema biće analizirana pomoću antikomutatorske Gribove funkcije [7,9]

$$G_{\vec{n}, \vec{m}}(t) = \Theta(t) \langle \{a_{\vec{n}}(t), a_{\vec{m}}^+(0)\} \rangle, \quad (2.22)$$

koja zadovoljava jednačinu kretanja:

$$i\hbar \frac{d}{dt} G_{\vec{n}, \vec{m}}(t) = i\hbar \delta_{\vec{n}, \vec{m}} \delta(t) + \Theta(t) \langle \{[a_{\vec{n}}, H], a_{\vec{m}}^+\} \rangle. \quad (2.23)$$

Nakon izračunavanja komutatora  $[a_{\vec{n}}, H]$  pri čemu su korišćene standardne fermionske komutatorske relacije:

$$\{a_{\vec{n}}, a_{\vec{m}}^+\} = \delta_{\vec{n}\vec{m}}, \quad \{a_{\vec{n}}, a_{\vec{m}}\} = \{a_{\vec{n}}^+, a_{\vec{m}}^+\} = 0, \quad (2.24)$$

jednačina kretanja (2.23) dobija oblik:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} G_{\vec{n},\vec{m}}(t) &= i\hbar \delta_{\vec{n}\vec{m}} \delta(t) + \Delta G_{\vec{n},\vec{m}}(t) - \\ &- W \left[ G_{n_x+1,n_y n_z;\vec{m}}(t) + G_{n_x-1,n_y n_z;\vec{m}}(t) + G_{n_x n_y+1,n_z;\vec{m}}(t) + \right. \\ &\left. + G_{n_x n_y-1,n_z;\vec{m}}(t) + G_{n_x n_y n_z+1;\vec{m}}(t) + G_{n_x n_y n_z-1;\vec{m}}(t) \right]. \end{aligned} \quad (2.25)$$

Pošto se radi o beskonačnoj translaciono invarijantnoj strukturi, moguće je izvršiti potpuni vremensko-prostorni Furije transform Grinovih funkcija, Kronekerovih simbola i delta funkcije:

$$G_{\vec{n},\vec{m}}(t) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega G_{\vec{k}}(\omega) e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})-i\omega t}, \quad (2.26)$$

$$\delta_{\vec{n}\vec{m}} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})}; \quad \delta(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega t}. \quad (2.27)$$

Zamenom u jednačinu (2.25) kretanja dobija se:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi N} \sum_{\vec{k}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})-i\omega t} \left\{ -i\hbar + 2\pi [\hbar\omega - \Delta + W (e^{+iak_x} + e^{-iak_x}) + \right. \\ \left. + W (e^{+iak_y} + e^{-iak_y} + e^{+iak_z} + e^{-iak_z})] G_{\vec{k}}(\omega) \right\} = 0, \end{aligned} \quad (2.28)$$

odnosno:

$$[\hbar\omega - \Delta + 2W (\cos ak_x + \cos ak_y + \cos ak_z)] G_{\vec{k}}(\omega) = \frac{i\hbar}{2\pi},$$

odakle dalje sledi:

$$G_{\vec{k}}(\omega) = \frac{i}{2\pi} \frac{1}{\omega - \omega_{\vec{k}}} \equiv \frac{i\hbar}{2\pi} \frac{1}{E - E_{\vec{k}}}, \quad (2.29)$$

gde

$$E_{\vec{k}} = \hbar \omega_{\vec{k}} = \Delta - 2W (\cos ak_x + \cos ak_y + \cos ak_z) \quad (2.30)$$

predstavlja zakon disperzije vezanih elektrona. U slučaju slabo vezanih elektrona (degenerisan elektronski gas),  $\Delta = 6W$  pa je:

$$\mathcal{E}_{\vec{k}} \equiv \frac{E_{\vec{k}}}{4W} = \sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y}{2} + \sin^2 \frac{ak_z}{2}. \quad (2.31)$$

## 2.3 Elektroni u film-strukturama

Istom metodom kao kod neograničenih kristalnih sistema može se doći do zakona disperzije u film-strukturama<sup>3</sup> [7,8].

### 2.3.1 Modelni hamiltonijan

Hamiltonijan vezanih elektrona u tankim kristalnim filmovima možemo formirati polazeći od „balkovskog“ hamiltonijana (2.18), odnosno (2.21), koji u aproksimaciji najbližih suseda ima razvijeni oblik:

$$\begin{aligned} H = & \sum_{n_x n_y n_z} \Delta_{n_x n_y n_z} a_{n_x n_y n_z}^+ a_{n_x n_y n_z} - \sum_{n_x n_y n_z} a_{n_x n_y n_z}^+ \times \\ & \times (W_{n_x n_y n_z; n_x+1, n_y n_z} a_{n_x+1, n_y n_z} + W_{n_x n_y n_z; n_x-1, n_y n_z} a_{n_x-1, n_y n_z} + \\ & + W_{n_x n_y n_z; n_x n_y+1, n_z} a_{n_x n_y+1, n_z} + W_{n_x n_y n_z; n_x n_y-1, n_z} a_{n_x n_y-1, n_z} + \\ & + W_{n_x n_y n_z; n_x n_y n_z+1} a_{n_x n_y n_z+1} + W_{n_x n_y n_z; n_x n_y n_z-1} a_{n_x n_y n_z-1}) . \end{aligned} \quad (2.32)$$

Pošto su granične površine filma uzete normalno na  $z$  - pravac, indeks sloja  $n_z$  u (2.32) - uzima vrednosti  $n_z = 0, 1, 2, \dots, N_z$ , gde je  $N_z \in [2, 20]$  kod ultratankih filmova. Indeksi  $n_x$  i  $n_y$ , koji određuju položaj atoma u svakom sloju mogu imati proizvoljne celobrojne vrednosti (praktično, od  $-\infty$ , do  $+\infty$ ).

Za razliku od idealnih beskonačnih struktura, realni kristali ne poseduju osobinu translacione invarijantnosti. Postojanje izvesnih graničnih uslova, jedan je od uzroka narušenja simetrije. Sistemi koji imaju dve paralelne granične površine nazivaju se filmovima. Posmatra se idealni tanki film kubne kristalne strukture, načinjen na substratu nekim tehničko-tehnološkim postupkom (naparavanjem, spaterovanjem i sl.). Pojam idealni film koristi se u smislu nenarušenja kristalne strukture (bez prisustva defekata, primesa i sl.), a ne u smislu prostorne neograničenosti. Dimenzije filma su takve da je on u  $XY$  ravnima beskonačan, a u  $z$  pravcima ima konačnu debljinu ( $L$ ). Znači da ovaj film poseduje dve beskonačne granične površine paralelne  $XY$  ravnima i to za:  $z = 0$  i  $z = L$  (slika 2.1).

Zbog postojanja granica uzima se da su površinski energetski parametri elektronskog filma oblika:

$$\begin{aligned} \Delta_{n_x n_y n_z} &= 0 & \text{za } n_z < 0 \text{ i } n_z > N_z , \\ \Delta_{n_x n_y n_z} &= \Delta & \text{za } 1 \leq n_z \leq N_z - 1 , \\ \Delta_{n_x n_y 0/N_z} &= \Delta(1 + \varepsilon_{1/2}) , \end{aligned} \quad (2.33)$$

$$\begin{aligned} W_{n_x n_y 0; n_x n_y n_z} &= 0 & \text{za } n_z < 0 , \\ W_{n_x n_y N_z; n_x n_y n_z} &= 0 & \text{za } n_z > N_z , \\ W_{n_x n_y n_z; n_x n_y, n_z+1} &= W & \text{za } 1 \leq n_z \leq N_z - 2 , \\ W_{n_x n_y n_z; n_x n_y, n_z-1} &= W & \text{za } 2 \leq n_z \leq N_z - 1 , \\ W_{n_x n_y 0; n_x n_y, 1} &= W(1 + w_1) , & W_{n_x n_y N_z-1; n_x n_y, N_z} = W(1 + w_2) ; \end{aligned} \quad (2.34)$$

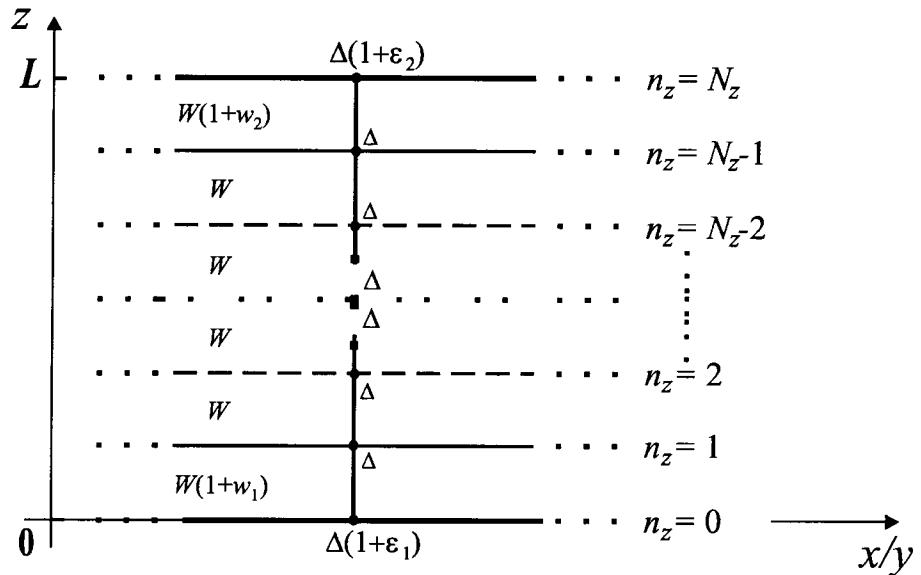
pri čemu je za svaki sloj,

$$W_{n_x n_y n_z; n_x \pm 1, n_y n_z} = W_{n_x n_y n_z; n_x n_y \pm 1, n_z} \equiv W , \quad (2.35)$$

gde je  $W$  - konstanta elektronskog transfera idealnog kristala.

---

<sup>3</sup>Filmovi predstavljaju beskonačne strukture u svim kristalnim ravnima paralelnim dvema graničnim površima, koje su normalne na jedan prioritetan pravac u prostoru, duž koga je posmatrani sistem ograničen.



Slika 2.1: Presek modela kristalnog filma u \$X(Y)Z\$ ravni

Elektronski hamiltonijan tankih kristalnih filmova možemo sada napisati u obliku:

$$H = H_z + H_p ,$$

$$\begin{aligned}
 H_z &= \sum_{m_x m_y} \sum_{m_z=2}^{N_z-2} a_{m_x m_y m_z}^+ [\Delta a_{m_x m_y m_z} - W (a_{m_x+1, m_y, m_z} + a_{m_x-1, m_y, m_z} + \\ &+ a_{m_x m_y+1, m_z} + a_{m_x m_y-1, m_z} + a_{m_x m_y m_z+1} + a_{m_x m_y m_z-1})] ; \\
 H_p &= \sum_{m_x m_y} \left\{ a_{m_x m_y 0}^+ [(1 + \varepsilon_1) \Delta a_{m_x m_y 0} - (1 + w_1) W a_{m_x m_y 1} - \right. \\
 &- W (a_{m_x+1 m_y 0} + a_{m_x-1 m_y 0} + a_{m_x m_y+1, 0} + a_{m_x m_y-1, 0})] + \\
 &+ a_{m_x m_y 1}^+ [\Delta a_{m_x m_y 1} - W a_{m_x m_y 2} - (1 + w_1) W a_{m_x m_y 0} - \\
 &- W (a_{m_x+1 m_y 1} + a_{m_x-1 m_y 1} + a_{m_x m_y+1, 1} + a_{m_x m_y-1, 1})] + \\
 &+ a_{m_x m_y N_z-1}^+ [\Delta a_{m_x m_y N_z-1} - W a_{m_x m_y N_z-2} - (1 + w_2) W a_{m_x m_y N_z} - \\
 &- W (a_{m_x+1 m_y N_z-1} + a_{m_x-1 m_y N_z-1} + a_{m_x m_y+1 N_z-1} + a_{m_x m_y-1 N_z-1})] + \\
 &+ a_{m_x m_y N_z}^+ [(1 + \varepsilon_2) \Delta a_{m_x m_y N_z} - (1 + w_2) W a_{m_x m_y N_z-1} - \\
 &\left. - W (a_{m_x+1 m_y N_z} + a_{m_x-1 m_y N_z} + a_{m_x m_y+1 N_z} + a_{m_x m_y-1 N_z})] \right\} \quad (2.36)
 \end{aligned}$$

Pomoću tako definisanog hamiltonijana, mogu se izračunati jednočestične antikomutatorske Grinove funkcije<sup>4</sup> (2.22) sličnom mikroteorijskom procedurom kao kod neograničenih kristala. Razlika je u tome što se ovde vrši vremenska i delimična prostorna Furije transformacija. Prostorna Furije-transformacija mora biti delimična \$(n\_x n\_y n\_z) \rightarrow (k\_x, k\_y, n\_z)\$ jer je posmatrani sistem ograničen duž \$z\$-pravca:

$$G_{n_x n_y n_z; \vec{m}}(t) = \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i[k_x a_x(n_x - m_x) + k_y a_y(n_y - m_y)]} e^{-i\omega t} G_{n_z; m_z}(k_x, k_y; \omega) \quad (2.37)$$

<sup>4</sup>Grinove funkcije određuju ravnotežna svojstva elektrona u tankim kristalnim filmovima [7-9].

$$\delta_{n_x m_x} \delta_{n_y m_y} \delta_{n_z m_z} = \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} e^{i[k_x a_x (n_x - m_x) + k_y a_y (n_y - m_y)]} \delta_{n_z m_z},$$

(gde je:  $n_z = 0, 1, 2, \dots, N_z$  i  $a_x = a_y = a$ ), te zamenom gornjih transformacija u jednačinu kretanja (2.25) dobija se sistem jednačina [7,8]:

$$\begin{aligned} (\varrho - \varepsilon_1 \frac{\Delta}{W}) G_0 + (1 + w_1) G_1 &= \mathcal{K}_0 \\ (1 + w_1) G_0 + \varrho G_1 + G_2 &= \mathcal{K}_1 \\ G_1 + \varrho G_2 + G_3 &= \mathcal{K}_2 \\ &\vdots && \vdots \\ G_{n_z-1} + \varrho G_{n_z} + G_{n_z+1} &= \mathcal{K}_{n_z} \\ &\vdots && \vdots \\ G_{N_z-3} + \varrho G_{N_z-2} + G_{N_z-1} &= \mathcal{K}_{N_z-2} \\ G_{N_z-2} + \varrho G_{N_z-1} + (1 + w_2) G_{N_z} &= \mathcal{K}_{N_z-1} \\ (1 + w_2) G_{N_z-1} + (\varrho - \varepsilon_2 \frac{\Delta}{W}) G_{N_z} &= \mathcal{K}_{N_z} \end{aligned} \quad (2.38)$$

pri čemu su uvedene oznake:

$$\begin{aligned} \varrho &= \hbar \frac{\omega}{W} - \frac{\Delta}{W} + 2(\cos ak_x + \cos ak_y); \\ G_{n_z; m_z}(k_x, k_y; \omega) &\equiv G_{n_z}; \quad \mathcal{K}_{n_z} = \frac{i\hbar}{2\pi W} \delta_{n_z, m_z} \end{aligned} \quad (2.39)$$

(indeks  $m_z$  je „parazitski”, pa je ovde izbačen). Ovaj sistem diferencnih algebarskih jednačina sadrži  $N_z + 1$  nepoznatih Grinovih funkcija:  $G_0, G_1, G_2, \dots, G_{N_z}$ . Na osnovu opštih algebarskih stavova, jasno je da se nepoznate mogu izraziti kao:

$$G_{n_z} = \frac{\mathcal{D}_{n_z}}{\mathcal{D}_{N_z+1}},$$

gde  $\mathcal{D}_{n_z}$  predstavlja odgovarajuću „zamensku” determinantu, a  $\mathcal{D}_{N_z+1}$  - determinantu sistema.

U cilju osnovnog zadatka ovog istraživanja, a to je određivanje elektronskih energija, potrebni su nam polovi Grinovih funkcija koji se dobijaju kada iste teže beskonačnosti [7-9], što znači da determinanta ovog sistema mora biti jednak nuli [7,8]:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{N_z+1}(\varrho) &= \left( \varrho - \frac{\Delta}{W} \varepsilon_1 \right) \left( \varrho - \frac{\Delta}{W} \varepsilon_2 \right) C_{N_z-1}(\varrho) - \left[ (1 + w_1)^2 \left( \varrho - \frac{\Delta}{W} \varepsilon_2 \right) + \right. \\ &\quad \left. + (1 + w_2)^2 \left( \varrho - \frac{\Delta}{W} \varepsilon_1 \right) \right] C_{N_z-2}(\varrho) + (1 + w_1)^2 (1 + w_2)^2 C_{N_z-3}(\varrho) \equiv 0, \end{aligned} \quad (2.40)$$

gde su  $C_{N_z}$  karakteristični Čebiševljevi polinomi druge vrste, koji zadovoljavaju rekurentnu relaciju:  $C_{n+1}(x) = xC_n(x) - C_{n-1}(x)$ , uz početne uslove:  $C_0(x) = 1$ ;  $C_1(x) = x$  [7,8].

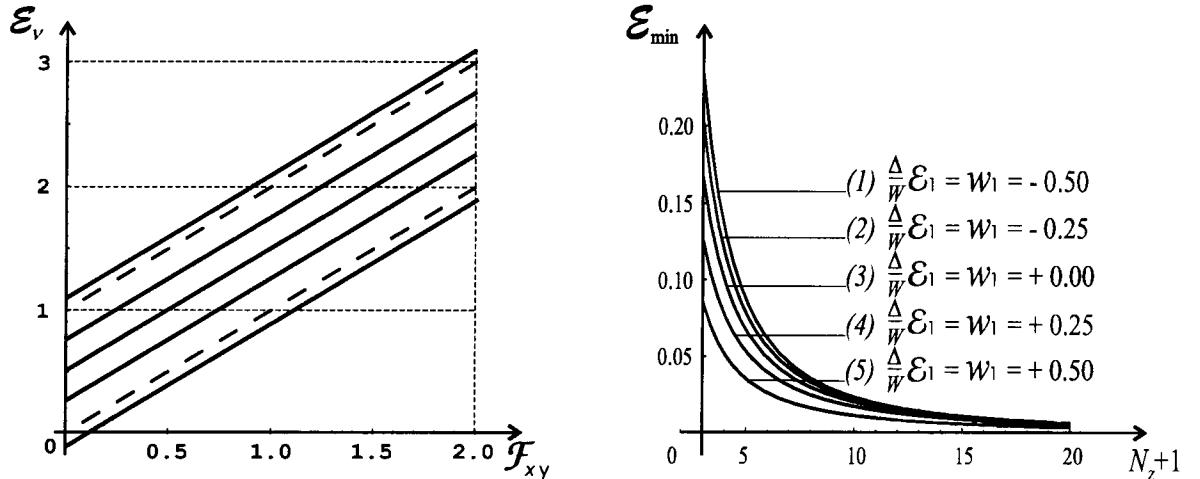
### 2.3.2 Zakon disperzije

U opštem slučaju uslov (2.40) nije analitički rešiv<sup>5</sup>, pa se pribegava numeričkom rešavanju (korišćenjem programskog paketa *Mathematica*) za zadate vrednosti parametara  $\varepsilon_{1/2}$ ,  $w_{1/2}$  i broj slojeva filma  $N_z$ . Rešavanjem jednačine (2.40) po promenljivoj  $\rho$  iz izraza (2.39), dobija se zakon disperzije elektrona u istom obliku kao i za neperturbovan film, ali je u ovom slučaju:

$$\mathcal{G}_{k_z(\nu)} = \frac{\rho_\nu + 2}{4}, \quad \nu = 1, 2, \dots, N_z + 1. \quad (2.41)$$

Numeričkom procedurom analizirali smo energije ( $\hbar\omega/W$ ) elektrona u zavisnosti od graničnih parametara uzimajući  $\frac{\Delta}{W}\varepsilon_{1/2} \in \{-0.5, 0.5\}$  i  $w_{1/2} \in \{-0.6, 0.6\}$ , za petoslojni film ( $N_z = 4$ ) pri  $k_x = k_y = 0$ . Analiza dobijenih rezultata pokazuje bitan uticaj graničnih parametara.

Uticaj graničnih parametara  $\varepsilon_{1/2}$  manifestuje se tako da sa njihovim povećanjem dolazi do pomeranja celog spektra ka višim vrednostima energija (donji gep se povećava, a gornji smanjuje). Sa druge strane, povećanjem parametara  $w_{1/2}$  zona dozvoljenih elektronskih energija u filmu se širi prema granicama balkovske energetske zone (veličine oba energetska gepa opadaju). Na taj način za pojedine vrednosti energetskega parametara neka od energetske stanja mogu da se nadju ispod i/ili iznad granica balkovske energetske zone. Takva stanja nazivaju se lokalizovana energetska stanja. Istovremena pojava gornjeg i donjeg lokalizovanog stanja prikazana je na slici 2.2, za vrednosti energetskega parametara  $\frac{\Delta}{W}\varepsilon_{1/2} = 0.5$  i  $w_{1/2} = 0.6$ .



Slika 2.2: Lokalizovana stanja elektrona (levo)

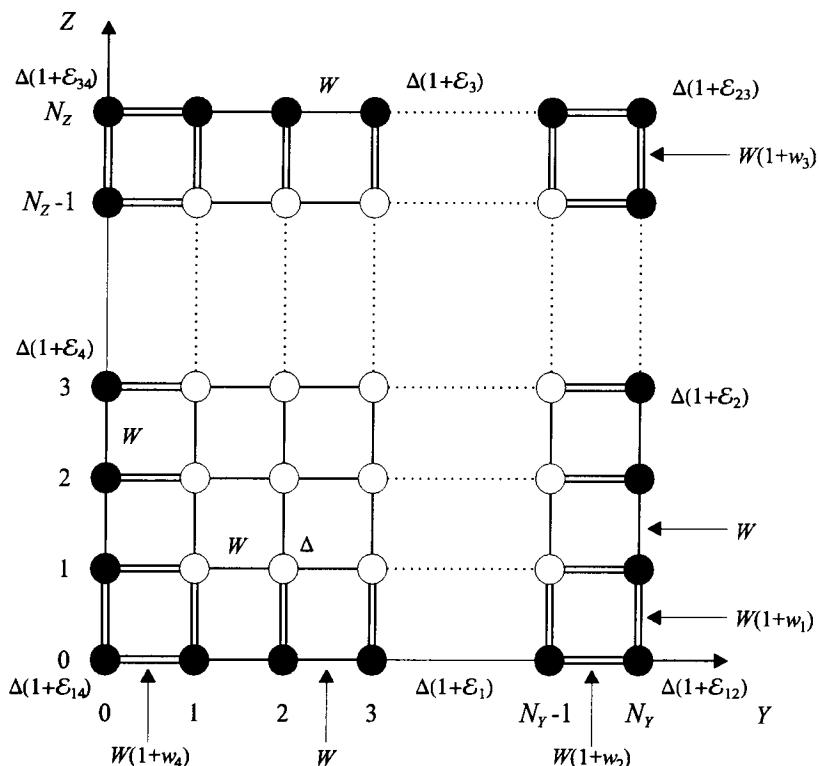
Slika 2.3: Zavisnost energetskog gepa od parametara (desno)

Veličine energetskega gepova takodje zavise od perturbacionih parametara. Ova zavisnost je prikazana na slici 2.3. za donji energetski gep ( $\varepsilon_2 = w_2 = 0$ ). Sa slike se vidi da je uticaj parametara dominantan samo za filmove malih debljin (do pet atomskih slojeva), dok sa povećanjem debljine filma gep teži nuli (kao i u slučaju neperturbovanog filma [7]).

<sup>5</sup>Uslov (2.40), može se rešiti analitički samo u slučajevima kada su  $w_1 = w_2 = 0$  a  $\varepsilon_{1/2}$  uzimaju vrednosti 0 ili  $-W/\Delta$ .

### 3 Elektroni u kvantnim žicama

U radu je posmatrana kvantna žica proste kubne kristalne strukture. Dimenziije žice su takve da je ona u  $x$  pravcu beskonačna, a u  $y$  i  $z$  pravcima ima konačnu debljinu ( $L_1$  i  $L_2$ ). Znači da ovaj sistem poseduje dve granične površine paralelne  $XZ$  ravnima i to za:  $y = 0$  i  $y = L_1$  i dve granične površine paralelne  $XY$  ravnima za:  $z = 0$  i  $z = L_2$ . Pošto su granične površine kvantne žice uzete normalno na  $y$  i  $z$  - pravce, indeksi slojeva  $n_y$  i  $n_z$  u (2.32) - uzimaju vrednosti  $n_y = 0, 1, 2, \dots, N_y$ ;  $n_z = 0, 1, 2, \dots, N_z$  gde je  $N_{y/z} \in [2, 20]$ . Indeks  $n_x$ , koji određuje položaj atoma u svakom sloju može imati proizvoljne celobrojne vrednosti (praktično, od  $-\infty$ , do  $+\infty$ ) [11-12]. Zbog postojanja granica žice, uzećemo da je energija elektrona oblika:



Slika 3.1: Presek kvantne žice

$$\begin{aligned}
 \Delta_{n_x 0,0} &= (1 + \epsilon_{14})\Delta, & \Delta_{n_x N_y 0} &= (1 + \epsilon_{12})\Delta, \\
 \Delta_{n_x N_y N_z} &= (1 + \epsilon_{23})\Delta, & \Delta_{n_x 0 N_z} &= (1 + \epsilon_{34})\Delta, \\
 \Delta_{n_x n_y 0} &= (1 + \epsilon_1)\Delta \quad \text{za } 1 \leq n_y \leq N_y - 1, \\
 \Delta_{n_x N_y N_z} &= (1 + \epsilon_2)\Delta \quad \text{za } 1 \leq n_z \leq N_z - 1, \\
 \Delta_{n_x n_y N_z} &= (1 + \epsilon_3)\Delta \quad \text{za } 1 \leq n_y \leq N_y - 1, \\
 \Delta_{n_x 0 n_z} &= (1 + \epsilon_4)\Delta \quad \text{za } 1 \leq n_z \leq N_z - 1,
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

a matrični elementi elektronskog preskoka sa sloja na sloj su:

$$W_{\vec{n}; n_x n_y + 1 n_x} = \begin{cases} (1 + w_4)W & \text{za } n_y = 0 \quad \text{i } 0 \leq n_z \leq N_z \\ W & \text{za } 1 \leq n_y \leq N_y - 2 \quad \text{i } 0 \leq n_z \leq N_z \\ (1 + w_2)W & \text{za } n_y = N_y - 1 \quad \text{i } 0 \leq n_z \leq N_z \\ 0 & \text{za } n_y = N_y \quad \text{i } 0 \leq n_z \leq N_z \end{cases} \tag{3.2}$$

$$W_{\vec{n};n_x n_y - 1 n_z} = \begin{cases} (1 + w_2)W & \text{za } n_y = N_y \\ W & \text{za } 2 \leq n_y \leq N_y - 1 \\ (1 + w_4)W & \text{za } n_y = 1 \\ 0 & \text{za } n_y = 0 \end{cases} \quad \begin{matrix} i & 0 \leq n_z \leq N_z \\ i & 0 \leq n_z \leq N_z \\ i & 0 \leq n_z \leq N_z \\ i & 0 \leq n_z \leq N_z \end{matrix} \quad (3.3)$$

$$W_{\vec{n};n_x n_y n_z + 1} = \begin{cases} (1 + w_1)W & \text{za } n_z = 0 \\ W & \text{za } 1 \leq n_z \leq N_z - 2 \\ (1 + w_3)W & \text{za } n_z = N_z - 1 \\ 0 & \text{za } n_z = N_z \end{cases} \quad \begin{matrix} i & 0 \leq n_y \leq N_y \\ i & 0 \leq n_y \leq N_y \\ i & 0 \leq n_y \leq N_y \\ i & 0 \leq n_y \leq N_y \end{matrix} \quad (3.4)$$

$$W_{\vec{n};n_x n_y n_z - 1} = \begin{cases} (1 + w_3)W & \text{za } n_z = N_z \\ W & \text{za } 2 \leq n_z \leq N_z - 1 \\ (1 + w_1)W & \text{za } n_z = 1 \\ 0 & \text{za } n_z = 0 \end{cases} \quad \begin{matrix} i & 0 \leq n_y \leq N_y \\ i & 0 \leq n_y \leq N_y \\ i & 0 \leq n_y \leq N_y \\ i & 0 \leq n_y \leq N_y \end{matrix} \quad (3.5)$$

pri čemu je za svaki sloj,

$$W_{n_x n_y n_z; n_x \pm 1, n_y n_z} \equiv W, \quad (3.6)$$

gde je  $W$  - konstanta elektronskog transfera idealnog kristala.

### 3.1 Modelni hamiltonijan

Elektronski hamiltonijan kvantnih žica slično kao i kod filma možemo napisati u obliku zbiru dva hamiltonijana, tako da je zapreminski hamiltonijan oblika:

$$H_z = \sum_{m_x} \sum_{m_y=2}^{N_y-2} \sum_{m_z=2}^{N_z-2} a_{m_x m_y m_z}^+ [\Delta a_{m_x m_y m_z} - W (a_{m_x+1, m_y m_z} + a_{m_x-1, m_y m_z} + a_{m_x m_y+1, m_z} + a_{m_x m_y-1, m_z} + a_{m_x m_y m_z+1} + a_{m_x m_y m_z-1})], \quad (3.7)$$

a površinski:

$$\begin{aligned} H_p = & \sum_{m_x} \left\{ \sum_{m_y=2}^{N_y-2} \left\{ a_{m_x m_y 0}^+ [(1 + \varepsilon_1) \Delta a_{m_x m_y 0} - (1 + w_1) W a_{m_x m_y 1} - \right. \right. \\ & - W (a_{m_x+1, m_y 0} + a_{m_x-1, m_y 0} + a_{m_x m_y+1, 0} + a_{m_x m_y-1, 0})] + \\ & + a_{m_x m_y 1}^+ [\Delta a_{m_x m_y 1} - (1 + w_1) W a_{m_x m_y 0} - W a_{m_x m_y 2} - \\ & - W (a_{m_x+1, m_y 1} + a_{m_x-1, m_y 1} + a_{m_x m_y+1, 1} + a_{m_x m_y-1, 1})] + \\ & + a_{m_x m_y N_z-1}^+ [\Delta a_{m_x m_y N_z-1} - (1 + w_3) W a_{m_x m_y N_z} - W a_{m_x m_y N_z-2} - \\ & - W (a_{m_x+1, m_y N_z-2} + a_{m_x-1, m_y N_z-2} + a_{m_x m_y+1, N_z-2} + a_{m_x m_y-1, N_z-2})] + \\ & + a_{m_x m_y N_z}^+ [(1 + \varepsilon_3) \Delta a_{m_x m_y N_z} - (1 + w_3) W a_{m_x m_y N_z-1} - \\ & - W (a_{m_x+1, m_y N_z} + a_{m_x-1, m_y N_z} + a_{m_x m_y+1, N_z} + a_{m_x m_y-1, N_z})] \Big\} + \\ & + \sum_{m_z=2}^{N_z-2} \left\{ a_{m_x 0 m_z}^+ [(1 + \varepsilon_4) \Delta a_{m_x 0 m_z} - (1 + w_4) W a_{m_x 1 m_z} - \right. \\ & - W (a_{m_x+1, 0 m_z} + a_{m_x-1, 0 m_z} + a_{m_x 0 m_z+1} + a_{m_x 0 m_z-1})] + \\ & + a_{m_x 1 m_z}^+ [\Delta a_{m_x 1 m_z} - (1 + w_4) W a_{m_x 0 m_z} - W a_{m_x 2 m_z} - \\ & - W (a_{m_x+1, 1 m_z} + a_{m_x-1, 1 m_z} + a_{m_x 1 m_z+1} + a_{m_x 1 m_z-1})] + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + a_{m_x N_y - 1, m_z}^+ [\Delta a_{m_x N_y - 1, m_z} - (1 + w_2) W a_{m_x N_y m_z} - W a_{m_x N_y - 2, m_z} - \\
& - W(a_{m_x + 1, N_y - 1, m_z} + a_{m_x - 1, N_y - 1, m_z} + a_{m_x N_y - 1, m_z + 1} + a_{m_x N_y - 1, m_z - 1})] + \\
& + a_{m_x N_y m_z}^+ [(1 + \varepsilon_2) \Delta a_{m_x N_y m_z} - (1 + w_2) W a_{m_x N_y - 1, m_z} - \\
& - W(a_{m_x + 1, N_y m_z} + a_{m_x - 1, N_y m_z} + a_{m_x N_y m_z + 1} + a_{m_x N_y m_z - 1})] \Big\} + \\
& + a_{m_x 1, 0}^+ [(1 + \varepsilon_1) \Delta a_{m_x 1, 0} - W(a_{m_x + 1, 1, 0} + a_{m_x - 1, 1, 0}) - \\
& - (1 + w_4) W a_{m_x 0, 0} - (1 + w_1) W a_{m_x 1, 1} - W a_{m_x 2, 0}] + \\
& + a_{m_x N_y - 1, 0}^+ [(1 + \varepsilon_1) \Delta a_{m_x N_y - 1, 0} - (1 + w_2) W a_{m_x N_y 0} - \\
& - W(a_{m_x + 1, N_y - 1, 0} + a_{m_x - 1, N_y - 1, 0} + a_{m_x N_y - 2, 0}) - W(1 + w_1) a_{m_x N_y - 1, 1}] + \\
& + a_{m_x N_y 1}^+ [(1 + \varepsilon_2) \Delta a_{m_x N_y 1} - W(a_{m_x + 1, N_y 1} + a_{m_x - 1, N_y 1}) - \\
& - (1 + w_2) W a_{m_x N_y - 1, 1} - (1 + w_1) W a_{m_x N_y 0} - W a_{m_x N_y 2}] + \\
& + a_{m_x N_y N_z - 1}^+ [(1 + \varepsilon_2) \Delta a_{m_x N_y N_z - 1} - W(a_{m_x + 1, N_y N_z - 1} + a_{m_x - 1, N_y N_z - 1}) - \\
& - (1 + w_2) W a_{m_x N_y - 1, N_z - 1} - (1 + w_3) W a_{m_x N_y N_z} - W a_{m_x N_y N_z - 2}] + \\
& + a_{m_x N_y - 1, N_z}^+ [(1 + \varepsilon_3) \Delta a_{m_x N_y - 1, N_z} - W(a_{m_x + 1, N_y - 1, N_z} + a_{m_x - 1, N_y - 1, N_z}) - \\
& - (1 + w_2) W a_{m_x N_y N_z} - (1 + w_3) W a_{m_x N_y - 1, N_z - 1} - W a_{m_x N_y - 2, N_z}] + \\
& + a_{m_x 1 N_z}^+ [(1 + \varepsilon_3) \Delta a_{m_x 1 N_z} - W(a_{m_x + 1, 1 N_z} + a_{m_x - 1, 1 N_z}) - \\
& - (1 + w_4) W a_{m_x 0 N_z} - (1 + w_3) W a_{m_x 1 N_z - 1} - W a_{m_x 2 N_z}] + \\
& + a_{m_x 0 N_z - 1}^+ [(1 + \varepsilon_4) \Delta a_{m_x 0 N_z - 1} - W(a_{m_x + 1, 0 N_z - 1} + a_{m_x - 1, 0 N_z - 1}) - \\
& - (1 + w_4) W a_{m_x 1 N_z - 1} - (1 + w_3) W a_{m_x 0 N_z} - W a_{m_x 0 N_z - 2}] + \\
& + a_{m_x 01}^+ [(1 + \varepsilon_4) \Delta a_{m_x 01} - W(a_{m_x + 1, 01} + a_{m_x - 1, 01}) - \\
& - (1 + w_4) W a_{m_x 1, 1} - (1 + w_1) W a_{m_x 0, 0} - W a_{m_x 0, 2}] + \\
& + a_{m_x 1 N_z - 1}^+ [\Delta a_{m_x 1 N_z - 1} - W(a_{m_x + 1, 1 N_z - 1} + a_{m_x - 1, 1 N_z - 1}) - \\
& - (1 + w_4) W a_{m_x 0 N_z - 1} - (1 + w_3) W a_{m_x 1 N_z} - W a_{m_x 1 N_z - 2} - W a_{m_x 2 N_z - 1}] + \\
& + a_{m_x 1, 1}^+ [\Delta a_{m_x 1, 1} - W(a_{m_x + 1, 1, 1} + a_{m_x - 1, 1, 1}) - \\
& - (1 + w_4) W a_{m_x 0, 1} - (1 + w_1) W a_{m_x 1, 0} - W a_{m_x 2, 1} - W a_{m_x 1, 2}] + \\
& + a_{m_x N_y - 1, 1}^+ [\Delta a_{m_x N_y - 1, 1} - W(a_{m_x + 1 N_y - 1, 1} + a_{m_x - 1 N_y - 1, 1}) - \\
& - (1 + w_2) W a_{m_x N_y 1} - (1 + w_1) W a_{m_x N_y - 1, 0} - W a_{m_x N_y - 2, 1} - W a_{m_x N_y - 1, 2}] + \\
& + a_{m_x N_y - 1, N_z - 1}^+ [\Delta a_{m_x N_y - 1, N_z - 1} - W(a_{m_x + 1 N_y - 1, N_z - 1} + a_{m_x - 1 N_y - 1, N_z - 1}) - \\
& - (1 + w_2) W a_{m_x N_y N_z - 1} - (1 + w_3) W a_{m_x N_y - 1, N_z} - \\
& - W(a_{m_x N_y - 2, N_z - 1} - a_{m_x N_y - 1, N_z - 2})] + \\
& + a_{m_x 0, 0}^+ [(1 + \varepsilon_{14}) \Delta a_{m_x 0, 0} - (1 + w_4) W a_{m_x 1, 0} - \\
& - (1 + w_1) W a_{m_x 0, 1} - W(a_{m_x + 1, 0, 0} + a_{m_x - 1, 0, 0})] + \\
& + a_{m_x N_y 0}^+ [(1 + \varepsilon_{12}) \Delta a_{m_x N_y 0} - (1 + w_2) W a_{m_x N_y - 1, 0} - \\
& - (1 + w_1) W a_{m_x N_y 1} - W(a_{m_x + 1, N_y 0} + a_{m_x - 1, N_y 0})] + \\
& + a_{m_x 0 N_z}^+ [(1 + \varepsilon_{34}) \Delta a_{m_x 0 N_z} - (1 + w_4) W a_{m_x 1 N_z} - \\
& - (1 + w_3) W a_{m_x 0 N_z - 1} - W(a_{m_x + 1, 0 N_z} + a_{m_x - 1, 0 N_z})] + \\
& + a_{m_x N_y N_z}^+ [(1 + \varepsilon_{23}) \Delta a_{m_x N_y N_z} - (1 + w_3) W a_{m_x N_y N_z - 1} - \\
& - (1 + w_2) W a_{m_x N_y - 1, N_z} - W(a_{m_x + 1, N_y N_z} + a_{m_x - 1, N_y N_z})] \Big\} \quad (3.8)
\end{aligned}$$

### 3.2 Jednačina kretanja

Zakon disperzije elektrona može se naći standardnim metodom Grinovih funkcija. Računa se jednočestična antikomutatorska Grinova funkcija pomoću prethodno definisanog Hamiltonijana sistema:

$$G_{\vec{n}, \vec{m}}(t) = \Theta(t) \langle \{a_{\vec{n}}(t), a_{\vec{m}}^+(0)\} \rangle, \quad (3.9)$$

koja zadovoljava jednačinu kretanja:

$$i\hbar \frac{d}{dt} G_{\vec{n}, \vec{m}}(t) = i\hbar \delta_{\vec{n}\vec{m}} \delta(t) + \Theta(t) \langle \{[a_{\vec{n}}, H], a_{\vec{m}}^+\} \rangle. \quad (3.10)$$

Za izračunavanje komutatora  $[a_{\vec{n}}, H]$  koriste se standardne fermionske antikomutatorske relacije:

$$\{a_{\vec{n}}, a_{\vec{m}}^+\} = \delta_{\vec{n}\vec{m}}, \quad \{a_{\vec{n}}, a_{\vec{m}}\} = \{a_{\vec{n}}^+, a_{\vec{m}}^+\} = 0, \quad (3.11)$$

Zamenom dobijenih komutatora u jednačinu kretanja i uvodjenjem vremenske ( $t \rightarrow \omega$ ) i delimične prostorne ( $\{n_x n_y n_z\} \rightarrow \{k_x n_y n_z\}$ ) Furije-transformacija:

$$G_{n_x n_y n_z; \vec{m}}(t) = \frac{1}{N_x} \sum_{k_x} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{ik_x a_x(n_x - m_x)} e^{-i\omega t} G_{n_y n_z; m_y m_z}(k_x; \omega) \quad (3.12)$$

$$\delta_{n_x m_x} \delta_{n_y m_y} \delta_{n_z m_z} = \frac{1}{N_x} \sum_{k_x} e^{ik_x a_x(n_x - m_x)} \delta_{n_y m_y} \delta_{n_z m_z},$$

(gde je:  $n_{y/z} = 0, 1, 2, \dots N_{y/z}$  i  $a_x = a$ ) dobija se sistem diferencnih jednačina:

$$1. \quad n_z = 0$$

$$(a) \quad n_y = 0$$

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - (1 + \varepsilon_{14})\Delta + 2W \cos ak_x] G_{0,0} + (1 + w_4)WG_{1,0} + \\ & + (1 + w_1)WG_{0,1} = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{0,m_y} \delta_{0,m_z} \end{aligned} \quad (3.13)$$

$$(b) \quad n_y = 1$$

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - (1 + \varepsilon_1)\Delta + 2W \cos ak_x] G_{1,0} + WG_{2,0} + \\ & + (1 + w_4)WG_{0,0} + (1 + w_1)WG_{1,1} = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{1,m_y} \delta_{0,m_z} \end{aligned} \quad (3.14)$$

$$(c) \quad 2 \leq n_y \leq N_y - 2$$

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - (1 + \varepsilon_1)\Delta + 2W \cos ak_x] G_{n_y,0} + W(G_{n_y+1,0} + G_{n_y-1,0}) + \\ & + (1 + w_1)WG_{n_y,1} = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{n_y, m_y} \delta_{0, m_z} \end{aligned} \quad (3.15)$$

$$(d) \quad n_y = N_y - 1$$

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - (1 + \varepsilon_1)\Delta + 2W \cos ak_x] G_{N_y-1,0} + (1 + w_2)WG_{N_y,0} + \\ & + WG_{N_y-2,0} + (1 + w_1)WG_{N_y-1,1} = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{N_y-1, m_y} \delta_{0, m_z} \end{aligned} \quad (3.16)$$

(e)  $n_y = N_y$ 

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - (1 + \varepsilon_{12})\Delta + 2W \cos ak_x] G_{N_y,0} + (1 + w_2)WG_{N_y-1,0} + \\ & + (1 + w_1)WG_{N_y,1} = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{N_y, m_y} \delta_{0, m_z} \end{aligned} \quad (3.17)$$

2.  $n_z = 1$ (a)  $n_y = 0$ 

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - (1 + \varepsilon_4)\Delta + 2W \cos ak_x] G_{0,1} + (1 + w_4)WG_{1,1} + \\ & + WG_{0,2} + (1 + w_1)WG_{0,0} = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{0, m_y} \delta_{1, m_z} \end{aligned} \quad (3.18)$$

(b)  $n_y = 1$ 

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - \Delta + 2W \cos ak_x] G_{1,1} + WG_{2,1} + (1 + w_4)WG_{0,1} + WG_{1,2} + \\ & + (1 + w_1)WG_{1,0} = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{1, m_y} \delta_{1, m_z} \end{aligned} \quad (3.19)$$

(c)  $2 \leq n_y \leq N_y - 2$ 

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - \Delta + 2W \cos ak_x] G_{n_y,1} + W(G_{n_y+1,1} + G_{n_y-1,1} + G_{n_y,2}) + \\ & + (1 + w_1)WG_{n_y,0} = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{n_y, m_y} \delta_{1, m_z} \end{aligned} \quad (3.20)$$

(d)  $n_y = N_y - 1$ 

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - \Delta + 2W \cos ak_x] G_{N_y-1,1} + (1 + w_2)WG_{N_y,1} + \\ & + W(G_{N_y-2,1} + G_{N_y-1,2}) + (1 + w_1)WG_{N_y-1,0} = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{N_y-1, m_y} \delta_{1, m_z} \end{aligned} \quad (3.21)$$

(e)  $n_y = N_y$ 

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - (1 + \varepsilon_2)\Delta + 2W \cos ak_x] G_{N_y,1} + (1 + w_2)WG_{N_y-1,1} + \\ & + WG_{N_y,2} + (1 + w_1)WG_{N_y,0} = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{N_y, m_y} \delta_{1, m_z} \end{aligned} \quad (3.22)$$

3.  $2 \leq n_z \leq N_z - 2$ (a)  $n_y = 0$ 

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - (1 + \varepsilon_4)\Delta + 2W \cos ak_x] G_{0, n_z} + (1 + w_4)WG_{1, n_z} + \\ & + W(G_{0, n_z+1} + G_{0, n_z-1}) = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{0, m_y} \delta_{n_z, m_z} \end{aligned} \quad (3.23)$$

(b)  $n_y = 1$ 

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - \Delta + 2W \cos ak_x] G_{1, n_z} + WG_{2, n_z} + (1 + w_4)WG_{0, n_z} + \\ & + W(G_{1, n_z+1} + G_{1, n_z-1}) = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{1, m_y} \delta_{n_z, m_z} \end{aligned} \quad (3.24)$$

(c)  $2 \leq n_y \leq N_y - 2$ 

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - \Delta + 2W \cos ak_x] G_{n_y, n_z} + W(G_{n_y+1, n_z} + G_{n_y-1, n_z}) + \\ & + W(G_{n_y, n_z+1} + G_{n_y, n_z-1}) = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{n_y, m_y} \delta_{n_z, m_z} \end{aligned} \quad (3.25)$$

(d)  $n_y = N_y - 1$ 

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - \Delta + 2W \cos ak_x] G_{N_y-1, n_z} + W((1+w_2)G_{N_y, n_z} + G_{N_y-2, n_z}) + \\ & + W(G_{N_y-1, n_z+1} + G_{N_y-1, n_z-1}) = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{N_y-1, m_y} \delta_{n_z, m_z} \end{aligned} \quad (3.26)$$

(e)  $n_y = N_y$ 

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - (1+\varepsilon_2)\Delta + 2W \cos ak_x] G_{N_y, n_z} + (1+w_2)WG_{N_y-1, n_z} + \\ & + W(G_{N_y, n_z+1} + G_{N_y, n_z-1}) = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{N_y, m_y} \delta_{n_z, m_z} \end{aligned} \quad (3.27)$$

4.  $n_z = N_z - 1$ (a)  $n_y = 0$ 

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - (1+\varepsilon_4)\Delta + 2W \cos ak_x] G_{0, N_z-1} + (1+w_4)WG_{1, N_z-1} + \\ & + (1+w_3)WG_{0, N_z} + WG_{0, N_z-2} = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{0, m_y} \delta_{N_z-1, m_z} \end{aligned} \quad (3.28)$$

(b)  $n_y = 1$ 

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - \Delta + 2W \cos ak_x] G_{1, N_z-1} + WG_{2, N_z-1} + (1+w_4)WG_{0, N_z-1} + \\ & + (1+w_3)WG_{1, N_z} + WG_{1, N_z-2} = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{1, m_y} \delta_{N_z-1, m_z} \end{aligned} \quad (3.29)$$

(c)  $2 \leq n_y \leq N_y - 2$ 

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - \Delta + 2W \cos ak_x] G_{n_y, N_z-1} + W(G_{n_y+1, N_z-1} + G_{n_y-1, N_z-1}) + \\ & + (1+w_3)WG_{n_y, N_z} + WG_{n_y, N_z-2} = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{n_y, m_y} \delta_{N_z-1, m_z} \end{aligned} \quad (3.30)$$

(d)  $n_y = N_y - 1$ 

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - \Delta + 2W \cos ak_x] G_{N_y-1, N_z-1} + (1+w_2)WG_{N_y, N_z-1} + WG_{N_y-2, N_z-1} + \\ & + (1+w_3)WG_{N_y-1, N_z} + WG_{N_y-1, N_z-2} = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{N_y-1, m_y} \delta_{N_z-1, m_z} \end{aligned} \quad (3.31)$$

(e)  $n_y = N_y$ 

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - (1+\varepsilon_2)\Delta + 2W \cos ak_x] G_{N_y, N_z-1} + (1+w_2)WG_{N_y-1, N_z-1} + \\ & + (1+w_3)WG_{N_y, N_z} + WG_{N_y, N_z-2} = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{N_y, m_y} \delta_{N_z-1, m_z} \end{aligned} \quad (3.32)$$

5.  $n_z = N_z$ (a)  $n_y = 0$ 

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - (1+\varepsilon_{34})\Delta + 2W \cos ak_x] G_{0, N_z} + (1+w_4)WG_{1, N_z} + \\ & + (1+w_3)WG_{0, N_z-1} = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{0, m_y} \delta_{N_z, m_z} \end{aligned} \quad (3.33)$$

(b)  $n_y = 1$ 

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - (1+\varepsilon_3)\Delta + 2W \cos ak_x] G_{1, N_z} + WG_{2, N_z} + (1+w_4)WG_{0, N_z} + \\ & + (1+w_3)WG_{1, N_z-1} = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{1, m_y} \delta_{N_z, m_z} \end{aligned} \quad (3.34)$$

(c)  $2 \leq n_y \leq N_y - 2$

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - (1 + \varepsilon_3)\Delta + 2W \cos ak_x] G_{n_y, N_z} + W(G_{n_y+1, N_z} + G_{n_y-1, N_z}) + \\ & + (1 + w_3)WG_{n_y, N_z-1} = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{n_y, m_y} \delta_{N_z, m_z} \end{aligned} \quad (3.35)$$

(d)  $n_y = N_y - 1$

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - (1 + \varepsilon_3)\Delta + 2W \cos ak_x] G_{N_y-1, N_z} + (1 + w_2)WG_{N_y, N_z} + WG_{N_y-2, N_z} + \\ & + (1 + w_3)WG_{N_y-1, N_z-1} = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{N_y-1, m_y} \delta_{N_z, m_z} \end{aligned} \quad (3.36)$$

(e)  $n_y = N_y$

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - (1 + \varepsilon_{23})\Delta + 2W \cos ak_x] G_{N_y, N_z} + (1 + w_2)WG_{N_y-1, N_z} + \\ & + (1 + w_3)WG_{N_y, N_z-1} = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{N_y, m_y} \delta_{N_z, m_z} \end{aligned} \quad (3.37)$$

Ovo je zapravo „dvodimenzionalni“ sistem jednačina (posebno po  $n_y$  i posebno po  $n_z$ ) i sadrži  $(N_y + 1) \times (N_z + 1)$  nepoznatih Grinovih funkcija koje se izražavaju kao:

$$G_{n_y n_z; m_y m_z} = \frac{D_{n_y n_z; m_y m_z}}{D_{N_y+1; N_z+1}},$$

gde je  $D_{n_y n_z; m_y m_z}$  zamenska determinanta, a  $D_{N_y+1; N_z+1}$  determinanta sistema. Kao i u slučaju filma nalaženje zakona disperzije svodi se na izračunavanje korena determinante.

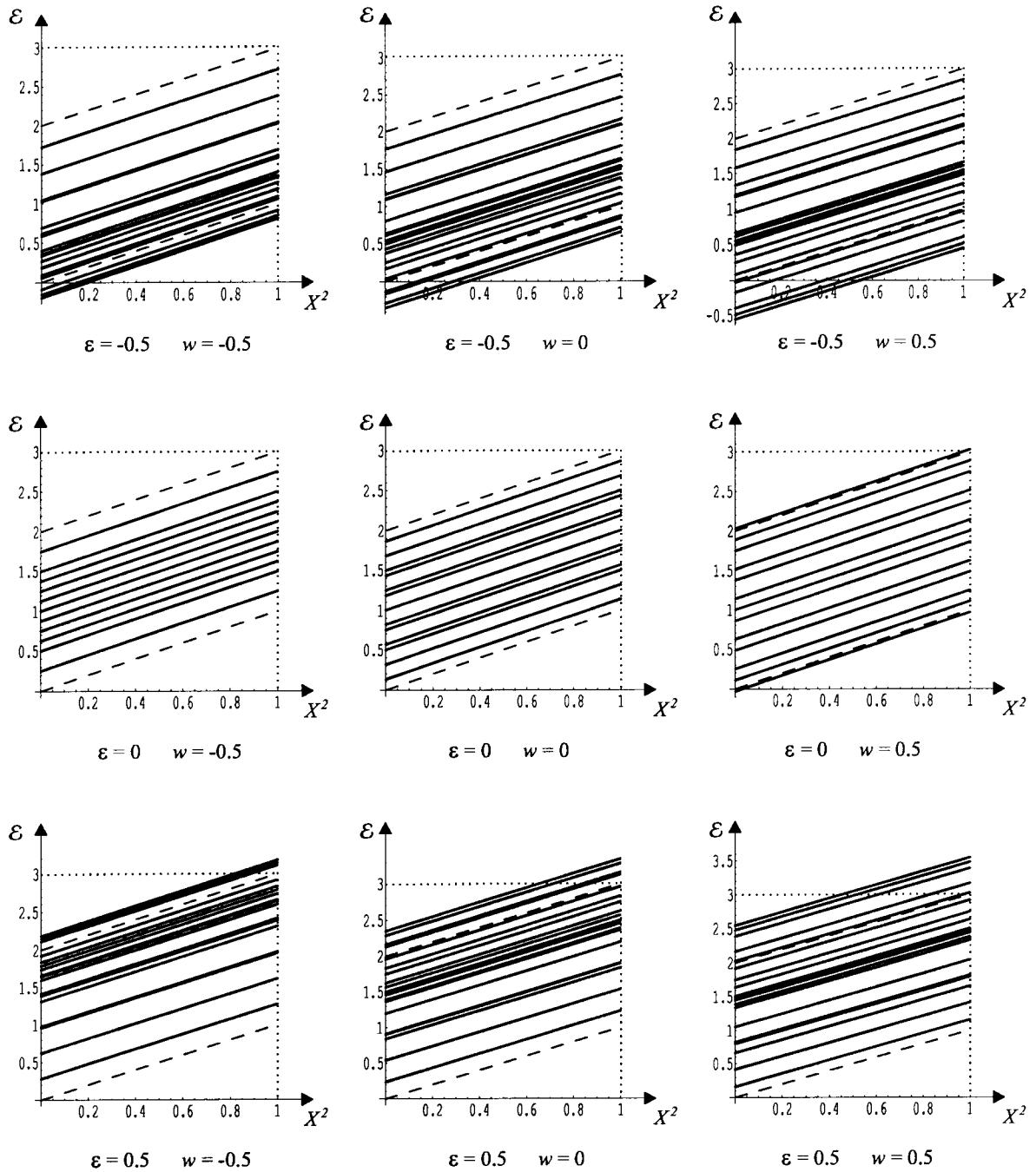
### 3.3 Zakon disperzije

Analitičku formu zakona disperzije moguće je dobiti samo u slučaju kada su svi perturbacioni parametri jednaki nuli. Da bi se ispitao uticaj ovih parametara na energetski spektar elektrona, neophodno je primeniti numeričke metode izračunavanja.

Na sledećim graficima (Slika 3.2) prikazani su rezultati numeričke analize za simetrično perturbovanu kvantnu žicu<sup>6</sup> sa  $(N_y + 1) \times (N_z + 1) = 5 \times 5$  slojeva. Za razne vrednosti perturbacionih parametara  $\varepsilon$  i  $w$  posmatrana je zavisnost  $\mathcal{E} = \mathcal{E}(X^2)$ , gde je  $\mathcal{E} = \frac{\hbar\omega}{4W}$  redukovana energija, a  $X = \sin \frac{ak_x}{2}$ .

---

<sup>6</sup>Pod simetrično perturbovanom kvantnom žicom podrazumeva se žica kod koje su svi parametri koji opisuju perturbaciju elektronske energije, na površinskim slojevima, jednaki i iznose  $\varepsilon$ , kao i parametri perturbacije elektronskog transfera -  $w$ .



Slika 3.2: Zavisnost energetskog spektra kvantne žice od parametara

Ono što se sa grafika odmah uočava je da je energetska zona kvantne žice izrazito diskretna za razliku od kontinualne energetske zone idealnog kristala [1,10]. Diskretizacija komponente talasnog vektora se javlja u onim pravcima duž kojih je posmatrani sistem ograničen. Broj diskretnih stanja bi po analogiji sa modelom kristalnog filma<sup>7</sup> trebao biti jednak broju slojeva žice. Međutim, ovde je uočeno da je broj stanja manji od očekivanog jer su neki od energetskih nivoa (u zavisnosti od vrednosti graničnih parametara) degenerisani ili su toliko blisko rasporedjeni da čine jednu praktično kontinualnu mini energetsku zonu.

Pored toga uočeni su sledeći uticaji perturbacionih parametara.

- Povećanjem energije elektrona lokalizovanih na površinskim i njima susednim slojevima (parametar  $w$ ) ceo spektar se širi.
- Ukoliko je energija elektrona na površinskim slojevima jača od balkovske ( $\epsilon > 0$ ) veći broj energetskih stanja se grupiše na višim energijama, a ukoliko je slabija ( $\epsilon < 0$ ) veći broj stanja grupisan je na nižim energijama. Kada je  $\epsilon = 0$  najveći broj stanja nalazi se na sredini energetske zone. Pri tome sa smanjenjem energetskog transfera elektrona (parametar  $w$ ) ova grupisana stanja postaju bliskija. Na taj način, za dovoljno male vrednosti ovog parametra oni mogu obrazovati jednu kontinualnu mini zonu.
- Pogodnim izborom perturbacionih parametara može se postići da neka od elektronskih stanja izadju ispod najniže i/ili iznad najviše balkovske energije, kada se dobijaju tzv. lokalizovana stanja elektrona.
- Za neke vrednosti energetskih parametara celokupna energetska zona kvantne žice nalazi se unutar dozvoljene energetske zone idealnog kristala. U ovom slučaju u energetskom spektru kvantne žice pojavljuju se energetski gepovi. Kao i u slučaju filma, veličine gepova opadaju sa povećanjem debljine žice [11,12], ali je kod žica to izraženije zbog ograničenosti u dve dimenzije.

---

<sup>7</sup>Za idealne beskonačne strukture kontinualna zona dozvoljenih elektronskih energija, pod uticajem dveju paralelnih graničnih površina kod filma, cepa se na diskretan niz kontinualnih (monoslojnih ili dvodimenzionih) podzona. Broj tih podzona jednak je broju atomskih slojeva izmedju dve granične površine filma.

## 4 Z a k l j u č a k

U radu je analiziran uticaj granica kvantne žice (sa primitivnom kubnom rešetkom) i perturbacionih parametara na tim granicama na energetski spektar (moguća energetska stanja) elektrona. Dobijeni rezultati su uporedjeni sa istim u balku i tankom filmu. Na osnovu ovoga se došlo do sledećih važnijih rezultata.

1. Ove analize su pokazale bitne razlike u zakonu disperzije elektrona u pomenutim sistemima, kao isključive posledice postojanja granica odgovarajuće strukture, u kojima je energetski spektar izrazito diskretan (za razliku od kontinualne energetske zone beskonačnog kristala). Diskretizacija se javlja u onim prvcima duž kojih je posmatrani sistem ograničen. Za razliku od kristalnog filma kod koga je broj diskretnih stanja jednak broju slojeva filma, kod kvantne žice, u zavisnosti od perturbacionih parametara, dolazi do degeneracije pojedinih energetskih nivoa.
2. Uticaj perturbacionih parametara je takav da se povećanjem energetskog transfera izmedju graničnih i njima susednih slojeva (parametar  $w$ ) ceo spektar širi, dok se povećanjem energije elektrona na površinskim slojevima (parametar  $\epsilon$ ) ceo spektar pomera ka višim energijama. Pored toga, u zavisnosti od veličine parametra  $\epsilon$  jedan broj stanja grupiše se u jednom delu energetske zone, koja pri dovoljno maloj vrednosti  $w$  postaju toliko bliska da obrazuju jednu praktično kontinualnu mini energetsku zonu.
3. Za neke vrednosti parametara ceo energetski spektar leži unutar granica energetske zone idealnog kristala. U ovom slučaju dolazi do pojave energetskih gepova čija veličina opada sa povećanjem debljine posmatranog sistema. Pogodnim izborom parametara može doći do pojave lokalizovanih energetskih stanja, čije energije leže van balkovskih energetskih granica.
4. Sve razlike izmedju posmatranih (neograničenih i ograničenih) kristalnih sistema su izraženije, što je film tanji, a žica tanja i uža, i iščezavaju kada debljina filma, odnosno debljina i širina kvantne žice, teže beskonačnosti. Variranjem energetskih perturbacionih parametara, kao i debljine uzoraka, mogu se uspešno menjati fizičke osobine posmatranih materijala (transportne, optičke, termodinamičke i sl.).

## 5 Literatura

1. A.S.Davydov:  
TEORIJA TVERDOGO TELA,  
*Nauka* Moskva 1976.
2. S.G. Davison, M. Steslicka:  
BASIC THEORY OF SURFACE STATES,  
*Clarendon Press*, Oxford 1996.
3. Ž.A.Sasojević i Z.V.Popović:  
ELEKTROTEHNIČKI I ELEKTRONSKI MATERIJALI,  
*Promezzia*, Beograd 1995.
4. V.N.Luckii i T.N.Pinsker:  
DIMENZIONAYA KVANTIZACIYA,  
*Znanie*, Moskva 1983.
5. M.G.Cottam and D.R.Tilley:  
INTRODUCTION TO SURFACE AND SUPERLATTICE EXCITATIONS,  
*Univ.Press.*, Cambridge 1989.
6. Z.Ikonić i V.Milanović:  
POLUPROVODNIČKE KVANTNE MIKROSTRUKTURE,  
*Univerzitet u Beogradu*, Beograd 1997.
7. S.M.Stojković:  
SPEKTRI I STANJA NOSILACA NAELEKTRISANJA I TRANSPORTNE KARAKTERISTIKE KVAZIDVODIMENZIONIH SUPERPROVODNIH MATERIJALA,  
*Mr teza*, ETF Beograd 1997.
8. A.Mitić:  
ELEKTRONSKI SPEKTRI TANKIH KRISTALNIH FILMOVA  
*Primatijada 2000*, Kopaonik 2000.
9. B.S.Tošić:  
STATISTIČKA FIZIKA,  
*PMF IF*, Novi Sad 1978.
10. D.Raković:  
FIZIČKE OSNOVE I KARAKTERISTIKE ELEKTROTEHNIČKIH MATERIJALA,  
*Elektrotehnički fakultet*, Beograd 1995.
11. I.Junger, S.M.Stojković, J.P.Šetrajčić, I.D.Vragović i S.B.Lazarev  
ELEKTRONSKI SPEKTRI U SIMETRIČNO PERTURBOVANOJ KVANTNOJ ŽICI  
*Tehnika - Novi materijali* 2/9, 1-5 (1999).
12. S.M.Stojković, J.P.Šetrajčić, D.Šijačić and I.Junger  
ELECTRON STATES IN SURFACE PERTURBED QUANTUM WIRES  
*18th European Conference on Surface Science (ECOSS)*, Vienna (Austria) 1999.

**UNIVERZITET U NOVOM SADU**  
**PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET**  
**KLJUČNA DOKUMENTACIJSKA INFORMACIJA**

- Redni broj:  
RBR
- Identifikacioni broj:  
IBR
- Tip dokumentacije:  
*Monografska dokumentacija*  
TD
- Tip zapisa:  
*Tekstualni štampani materijal*  
TZ
- Vrsta rada: *Diplomski rad*  
VR
- Autor: *Andrija Mitić, br.dos.129/92*  
AU
- Mentor: *Dr Jovan Šetračić,*  
*redovni profesor, PMF, Novi Sad*  
MN
- Naslov rada: *Elektronski spektri*  
*u perturbovanoj kvantnoj žici*  
NR
- Jezik publikacije: *Srpski (latinica)*  
JP
- Jezik izvoda: *Srpski*  
JI
- Zemlja publikovanja: *Jugoslavija*  
ZP
- Uže geografsko područje: *Vojvodina*  
UGP
- Godina: *2000.*  
GO
- Izdavač: *Autorski reprint*  
IZ
- Mesto i adresa: *Prirodno-matematički fakultet, Trg Dositeja Obradovića 4, 21000 Novi Sad*  
MA
- Fizički opis rada: *(5/26/12/0/5/11/0)*  
FO
- Naučna oblast: *Fizika*  
NO
- Naučna disciplina: *Fizika čvrstog stanja*  
ND
- Predmetna odrednica / ključne reči:  
*kvantne žice, elektroni, Grinove funkcije,*  
*spektri, stanja, gepovi*  
PO
- Čuva se: *Biblioteka Instituta za fiziku, PMF,*  
*Novi Sad*
- Izvod: *U radu je primjenjen metod Grinovih*  
*funkcija za ispitivanje uticaja graničnih uslova*  
*(postojanje graničnih površina i perturbovani*  
*energetski parametri na i u graničnim slojevima)* na energetski spektar i moguća stanja  
elektrona (elektronski zakon disperzije) kod  
kvantnih žica sa primitivnom kubnom celijom.  
*Dobijeni rezultati predstavljeni su grafički i*  
*izvršene su analize, odnosno njihova poredjena*  
*sa odgovarajućim rezultatima u idealnim*  
*beskonačnim i film-strukturama.*  
*Na osnovu toga uočene su najbitnije razlike*  
*izmedju posmatranih sistema.*  
IZ
- Datum prihvatanja teme od strane Veća:  
*01.09.2000.*  
DP
- Datum odbrane: *12.09.2000.*  
DO
- Članovi komisije:  
Predsednik:  
*Dr Ljiljana Mašković,*  
*redovni profesor, PMF, Novi Sad*  
Članovi:  
*Dr Jovan Šetračić,*  
*redovni profesor, PMF, Novi Sad*  
*Dr Zoran Mijatović,*  
*docent, PMF, Novi Sad*  
KO