

Пријеље #:			
26. маја 1997.			
Орг. јед.	Број	Садрж.	Вредност
0603	9/127		

UNIVERZITET U NOVOM SADU  
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET  
INSTITUT ZA FIZIKU

Biljana Abramović

**ЛОКАЛИЗОВАНА СТАЊА ЕЛЕКТРОНА  
ЈЕДНОСЛОЈНИХ КРИСТАЛА**

– ДИПЛОМСКИ РАД –

MENTOR: PROF. DR JOVAN ŠETRAJČIĆ

NOVI SAD, 1997.

*„Za koji dan pašće sneg. Sećanje mi dodje  
Na prošlu godinu. Sećam se sete što traje  
Uz vatru. Da me je neko pitao: šta je?  
Rekao bih: pusti, baš ništa, to će da prodje.”*

Francis Žam

Ovaj rad je izradjen u Laboratoriji za teorijsku fiziku,  
Instituta za fiziku Prirodno-matematičkog fakulteta u  
Novom Sadu, pod mentorstvom prof.dr Jovana Šetrajčića.

*Koristim priliku da se zahvalim mentoru, kolegama Sladjani Stojković i Igoru  
Vragoviću kao i svom bratu Bojanu Abramoviću na pomoći prilikom izrade ovog  
rada.*

## SADRŽAJ

	Strana
1. UVOD .....	4
2. ELEKTRONI U IDEALNIM KRISTALIMA .....	5
2.1. Provodni elektroni u metalima .....	6
2.2. Elektroni u periodičnom potencijalu .....	8
2.3. Brzina, ubrzanje i efektivna masa .....	10
2.4. Zakon disperzije .....	13
3. ELEKTRONI U FILM-STRUKTURAMA .....	17
3.1. Modelni hamiltonijan .....	17
3.2. Jednačine kretanja .....	19
3.3. Zakon disperzije .....	22
3.4. Elektronska stanja .....	26
4. ZAKLJUČAK .....	28
5. DODATAK: Grinove funkcije i Čebiševljevi polinomi .....	29
5.1. Metod Grinovih funkcija .....	29
5.2. Polovi elektronskih Grinovih funkcija .....	32
5.3. Karakteristični polimoni Čebiševa .....	34
6. LITERATURA .....	35

## 1. UVOD

Predmet ovog rada je ispitivanje elektronskih spektara u kristalnim film-strukturama i njihovo poredjenje sa istim u idealnim, beskonačnim strukturama. U teoriji kondenzovane materije se najčešće analiziraju strukture koje su prostorno homogene i poseduju osobinu translacione invarijantnosti. 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. Upravo zbog toga je značajna analiza elektronskih stanja u realnijim kristalnim strukturama, kao što su npr. filmovi.

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

Ispitivanje elektronskog ponašanja, koji, pored fononskog, predstavlja fundamentalni fizički podsistem, je od značaja iz razloga što su upravo (kvazi)slobodna nanelektrisanja nosioci svih transportnih i termičkih procesa u fizici kondenzovane materije. U ovom radu istraženi su uticaji graničnih parametara na energetski spektar i moguća stanja elektrona (promene u zakonu disperzije).

Pomenuta analiza vršena je korišćenjem metoda Grinovih funkcija<sup>1</sup>. Primenjeni metod je odabran zbog pogodnosti koje nam nudi definicija polova Grinovih funkcija<sup>2</sup>.

Odabranom metodom najpre su vršena istraživanja na idealnim beskonačnim strukturama, a zatim na kristalnim filmovima i to zbog toga da bi se na osnovu tih rezultata uočile najbitnije razlike za film strukturu. Takođe su za slučaj film strukture numeričkim putem nadjene promene redukovanih energija elektrona u zavisnosti od promene graničnih parametara. Poseban osvrt dat je za uočena lokalizovana stanja gde je ispitana zavisnost energije od broja kristalnih slojeva.

<sup>1</sup>Postoje i drugi metodi pomoću kojih se ovaj problem može tretirati: metod Hajzenbergovih jednačina kretanja, metod malih perturbacija, metod talasnih funkcija i sl.

<sup>2</sup>Realni delovi polova Grinovih funkcija su proporcionalni energijama elementarnih eksicitacija (pobudjenja) koje se javljaju u sistemu (odakle dobijamo njihov zakon disperzije), a imaginarni - recipročnim vrednostima vremena života tih eksicitacija.

## 2. ELEKTRONI U IDEALNIM KRISTALIMA

Translaciona invarijantnost idealnih kristalnih struktura nameće periodičan (sa periodom kristalne rešetke) oblik mnogim fizičkim veličinama koje ih opisuju (naprimjer, periodična raspodela polja i potencijalna energija elektrona).

Jedan od glavnih zadataka teorije čvrstog stanja je proučavanje promena diskretnog energetskog spektra elektrona izolovanog atoma - pri približavanju atoma i obravnavanju 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. 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 medjusobno veoma preklapaju, dovodeći do kolektiviziranosti ovih stanja, kojima se na taj načina 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 obnir uvodjenjem efektivne mase kvazislobodnih nosilaca nanelektrisanja.

Takodje, zbog specifičnosti kretanja elektrona u kristalnom polju, anomalnog ponašanja kvazislobodnih elektrona na krajevima valentne zone, uvodi se pojam kvazislobodnih nosilaca - šupljina.

## 2.1. Provodni elektroni u metalima

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. Totalna energija je jednaka kinetičkoj, što znači da se potencijalna ne uzima u obzir.

Poznato je da je stvarna raspodela provodnih elektrona rezultat uticaja jakog električnog potencijala jona. Upotrebljivost ovog modela zavisi od kinetičkih svojstava provodnih elektrona. Postavke ovog modela bile su date mnogo pre otkrića kvantne mehanike. Klasična teorija je imala nekoliko uspeha, ali i nedostataka. U uspehe spadaju izvodjenje Omovog zakona ( $j = \sigma \vec{E}$ ) 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. Provodni elektron može da se kreće u metalu po pravoj putanji dužine većeg broja medjuatomskih rastojanja a da se ne sudari sa drugim elektronima ili atomskim ostacima. Odnosno, provodni elektroni se, u tom smislu, ponašaju kao gas neinteragujućih čestica. Razlozi za to su sledeći

- Slobodan elektron ne skreće pod uticajem jona uredjenih u periodičnu rešetku, jer se talasi materije prostiru slobodno u periodičnim strukturama.
- Provodni elektroni se retko sudsaraju sa drugim elektronima, što je posledica Paulijevog principa isključenja.

Elektrone u metalima se mogu, uz grublje aproksimacije, posmatrati kao i elektroni u Fermijevom gasu slobodnih čestica (gas slobodnih neinteragujućih elektrona podvrgnutih Paulijevom principu), kada su energije zadate kinetičkom energijom translacije:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} , \quad (2.1)$$

gde je  $\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$  - talasni vektor.

U slučaju kada je

$$e^\nu \ll 1 ; \quad \nu = \frac{\mu}{kT} ,$$

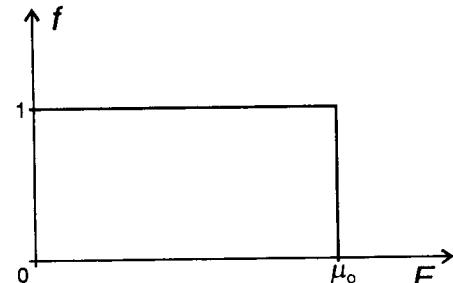
$\mu$  - hemijski potencijal, kvantni efekti postaju dominantniji ako je toplotna energija znatno niža od hemijskog potencijala:  $\mu >> kT$ . Čestice se pokoravaju Paulijevom principu. Na apsolutnoj nuli one popunjavaju redom najniža kvantna stanja. Takav gas nazivamo potpuno degenerisanim fermionskim gasom. Značaj Paulijevog principa se znatno manifestuje u izgledu funkcije raspodele osnovnog stanja fermiona.

Specijalizirajući Fermi-Dirakovu funkciju:

$$f = \left[ \exp \left( \frac{E - \mu}{kT} + 1 \right) \right]^{-1}, \quad (2.2)$$

$$\text{na } T = 0 \text{ K, } f = \begin{cases} 1 & E \leq \mu_0 \\ 0 & E > \mu_0 \end{cases}$$

$\mu_0$  - vrednost hemijskog potencijala na apsolutnoj nuli.



Slika 2.1: Fermijeva funkcija na apsolutnoj nuli

Na  $T = 0$  K sva stanja sa energijama manjim od  $\mu_0$  su popunjena, a viša energetska stanja su prazna, pa je  $\mu_0$  jednak graničnoj energiji degenerisanog gasa (slika 2.1).

Zauzeta stanja na  $T = 0$  K mogu se prikazati sferom u prostoru talasnog vektora, koja se zove Fermijeva sfera. Njen radijus je Fermijev talasni vektor  $\vec{k}_F$ , koji određuje graničnu - Fermijevu energiju:

$$\mu_0 = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}. \quad (2.3)$$

Temperatura pridružena ovoj energiji je temperatura degeneracije:  $T_F = \mu_0/k_B$ . Fermionski gas je degenerisan u području gde važi  $T \ll T_F$ . Brzina čestice obračunata od vrha Fermijeve raspodele može da se izrazi pomoću  $k_F$ , odnosno pomoću, granične brzine fermiona na apsolutnoj nuli:  $v_F = \hbar k_F/m$ .

Kako je ukupna energija osnovnog stanja fermionskog gasa:

$$E_U = \int f E \, dN = \frac{3}{5} N \mu_0, \quad (2.4)$$

srednja energija biće:  $E_0 = (E_U/N) = (3/5)\mu_0$ , gde je  $N$  ukupan broj čestica gasa.

Rezultati prethodno razmotrenog ponašanja idealnog Fermi-Dirakovog degenerisanog gasa, se mogu primeniti na realne fermionske sisteme.

## 2.2. Elektroni u periodičnom potencijalu

Elektroni i joni u kristalu, u strogom smislu, čine jedan kvantni sistem, čije rešenje treba naći. Rešavanje ovakvog sistema je suviše komplikovano, pa se pribegava raznim aproksimacijama. Posmatrajući elektrone kao nezavisne čestice koje se kreću pod ukupnim uticajem svih sila i zanemarujući nepravilnosti u gradji kristalne rešetke kao i oscilovanja atoma oko ravnotežnih položaja, uzima se da se svaki elektron kreće u potencijalu koji je periodičan sa periodom kristalne celije:

$$U(\vec{r}) = U(\vec{r} + \vec{n}), \quad (2.5)$$

gde je  $\vec{n} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$  - vektor translacije kristalne rešetke. U takvom periodičnom potencijalu talasne funkcije elektrona imaju neka opšta svojstva koja proizilaze neposredno iz Šredingerove jednačine:

$$H \Psi = E \Psi, \quad (2.6)$$

pri čemu je Hamiltonov operator:

$$H(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{r}). \quad (2.7)$$

Razmatra se kako se translaciona simetrija odražava na svojstva talasnih funkcija elektrona  $\Psi_n(\vec{r})$  odnosno na svojstvene funkcije hamiltonijana  $H$ . Delovanje operatora translacije  $T_{\vec{n}}$  definisano je na sledeći način:

$$T_{\vec{n}} \Psi_n(\vec{r}) = \Psi_n(T_{\vec{n}} \vec{r}) = \Psi_n(\vec{r} - \vec{n}), \quad (2.8)$$

gde funkcija  $\Psi_n(\vec{r} - \vec{n})$  pripada istom funkcionskom (Hilbertovom) prostoru kao i  $\Psi_n(\vec{r})$ . Pošto je hamiltonijan  $H$  translaciono invarijantan, što znači da komutira sa operatorom  $T_{\vec{n}}$ , a  $\Psi_n(\vec{r})$  je i njegova svojstvena funkcija, to na osnovu gornje relacije sledi

$$H [T_{\vec{n}} \Psi_n(\vec{r})] = T_{\vec{n}} [H \Psi_n(\vec{r})] = T_{\vec{n}} [E_n \Psi_n(\vec{r})] = E_n [T_{\vec{n}} \Psi_n(\vec{r})], \quad (2.9)$$

gde je  $E_n$  svojstvena vrednost jednoelektronskog hamiltonijana  $H$ . Iz relacije (2.9) sledi da su i  $\Psi_n(\vec{r})$  i  $T_{\vec{n}}\Psi_n(\vec{r})$  svojstvene funkcije hamiltonijana  $H$  sa istom svojstvenom vrednošću  $E_n$ . Ako je  $E_n$  nedegenerisana svojstvena vrednost, onda joj odgovara samo jedna svojstvena funkcija, pa sledi da su u tom slučaju funkcije  $\Psi_n(\vec{r})$  i  $T_{\vec{n}}\Psi_n(\vec{r})$  jednake do na fazni množitelj, odnosno da je

$$T_{\vec{n}}\Psi_n(\vec{r}) = t_{\vec{n}}\Psi_n(\vec{r}); \quad |t_{\vec{n}}|^2 = 1, \quad (2.10)$$

pri čemu fazni množitelj  $t_{\vec{n}}$  ima smisao svojstvene vrednosti operatora  $T_{\vec{n}}$ .

Lako se pokazuje da za talasne funkcije važe sledeća transformaciona svojstva:

$$T_{\vec{n}} \Psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) \equiv T_{\vec{n}}^{\vec{k}} \Psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \Psi_{n\vec{k}}(\vec{r} - \vec{n}) = e^{-i\vec{k}\vec{n}} \Psi_{n\vec{k}}(\vec{r}), \quad (2.11)$$

gde je uveden indeks  $\vec{k}$  jer talasne funkcije zavise od talasnog vektora  $\vec{k}$ . Iz ovih relacija sledi da je

$$t_{\vec{n}} \equiv t_{\vec{n}\vec{k}} = e^{-i\vec{k}\vec{n}} \quad (2.12)$$

Iz gornjih jednačina takodje sledi da jednoelektronska talasna funkcija zadovoljava relaciju

$$\Psi_{n\vec{k}}(\vec{r} - \vec{n}) = e^{-i\vec{k}\vec{n}} \Psi_{n\vec{k}}(\vec{r}). \quad (2.13)$$

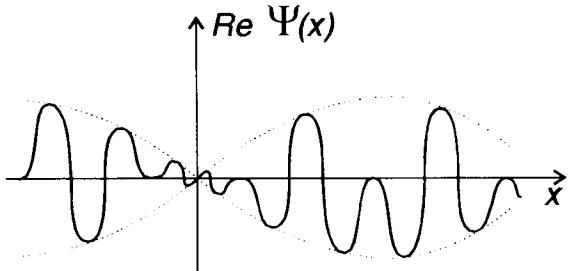
Da bi funkcija  $\Psi_{n\vec{k}}(\vec{r})$  zadovoljavala prethodnu relaciju mora da bude oblika

$$\Psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \Phi_{n\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}}, \quad (2.14)$$

pri čemu funkcija  $\Phi$  mora biti periodična sa periodom rešetke:

$$\Phi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \Phi_{n\vec{k}}(\vec{r} - \vec{n}) \quad (2.15)$$

Poslednje dve relacije predstavljaju matematičke iskaze Blohove teoreme. Za  $\Phi = \text{const}$  iz drugog oblika ove teoreme sledi da talasna funkcija elektrona ima oblik ravnog talasa, pri čemu  $\vec{k}$  ima smisao talasnog vektora. Za elektron u kristalu, kada  $\Phi$  nije konstanta, može se smatrati da  $\vec{k}$  ima isti smisao, ali u tom slučaju, što inače sledi iz Blohove teoreme, talasna funkcija je funkcija položaja sa periodom rešetke. Ova talasna funkcija se naziva *Blohova talasna funkcija* (slika 2.2). Konkretni oblik modulisane amplitute  $\Phi$  zavisi od oblika periodičnog potencijala kristala koji deluje na elektron.



**Slika 2.2:** Realni deo Blohove funkcije uzduž čvornih veza u kristalnoj rešetki

Uvrštavanjem Blohove funkcije u Šredingerovu jednačinu (2.7), dobija se nova jednačina za periodični faktor:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla + i\vec{k})^2 \Phi_{n\vec{k}} + U(\vec{r}) \Phi_{n\vec{k}} = E_{n\vec{k}} \Phi_{n\vec{k}}(\vec{r}). \quad (2.16)$$

Pošto su talasne funkcije i energije elektrona periodične u prostoru inverzne rešetke, to je dovoljno svojstveni problem hamiltonijana rešavati samo u oblasti koja odgovara zapremini jedne elementarne celije, pri čemu na granicama te oblasti treba zadati periodične granične uslove<sup>3</sup>.

<sup>3</sup>Funkcija  $\Phi_{n\vec{k}}$  mora biti ista na suprotnim stranicama celije, što su granični uslovi jednačine.

Za neke energije talasni vektor  $\vec{k}$  postaje kompleksan. Takve vrednosti se isključuju iz energetskog spektra jer, u protivnom, gustina verovatnoće ne bi imala svojstvo translacione invarijantnosti<sup>4</sup>. Suprotno od energije slobodnog elektrona, energija elektrona u periodičnom potencijalu ne može da se kontinualno menja. Potpuni spektar prethodne jednačine, dakle, zavisi od celog broja  $l$  i parametra  $\vec{k}$ , što se može predstaviti kao niz energetskih zona  $E_l(\vec{k})$ . Za svaki broj  $l$  postoji kontinuum energija odredjene širine, čije zone mogu biti razmagnute ili se prekrivaju. U svakoj zoni ima ukupno  $N$  energetskih nivoa, pri čemu ako je  $N$  dovoljno veliko, onda se susedne diskretne vrednosti  $\vec{k}$  malo razlikuju, pa se može uzeti da je  $\vec{k}$  neprekidna promenljiva i da je  $E_{\vec{k}}$  neprekidna funkcija talasnog vektora.

### 2.3. Brzina, ubrzanje i efektivna masa

Kako kvazislobodni elektroni u metalu čine degenerisan gas, odnosno, podvrgavaju se kvantnoj Fermi-Dirakovoј statistici, potrebno je napustiti klasičnu predstavu elektrona kao čestice i posmatrati njegovu dualnu (čestično-talasnu) kvantomehaničku prirodu.

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 tada je odredjena grupnom brzinom talasnog paketa:

$$v = \frac{d\nu}{d(1/\lambda)} = \frac{d\omega}{dk}.$$

Kako je  $\nu = E/h$ , gde je  $\nu$  - frekvencija, onda je brzina elektrona:

$$\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla E(\vec{k}). \quad (2.17)$$

Na osnovu toga, ubrzanje elektrona će biti:

$$\vec{a} = \frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{d}{dt} \left( \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial \vec{k}} \right) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 E}{\partial \vec{k} \partial \vec{k}} \frac{\partial \vec{k}}{\partial t}. \quad (2.18)$$

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

$$\frac{dE}{dt} = \vec{F} \cdot \vec{v}, \quad (2.19)$$

pa se na osnovu toga dobija:

$$\vec{a} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial \vec{k} \partial \vec{k}} \vec{F} \equiv \frac{\vec{F}}{m^*}, \quad (2.20)$$

---

<sup>4</sup>Stanja sa imaginarnim vrednostima talasnog vektora su tzv. lokalizovana stanja sistema (o njima će biti više reči u poglavljju 3.4).

gde je veličina  $\frac{1}{m^*}$  tenzor recipročne efektivne mase. Elementi ovog tenzora odredjeni su odgovarajućim izvodima energije po komponentama talasnog vektora:

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial \vec{k} \partial \vec{k}} \quad \text{tj.} \quad \left( \frac{1}{m^*} \right)_{\alpha\beta} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial k_\alpha \partial k_\beta} \quad \alpha, \beta = x, y, z . \quad (2.21)$$

U slučaju primitivne kubne rešetke, koja ima medjusobno normalne ose, jedinični vektori u smeru osa  $x, y, z$  redom, su označeni kao:

$$\{\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3\} \rightarrow \vec{a}_1 = \vec{e}_1 a; \vec{a}_2 = \vec{e}_2 a; \vec{a}_3 = \vec{e}_3 a ,$$

gde je  $a$  - dužina ivice elementarne kocke, a izraz za talasni vektor je onda:

$$\vec{k} = 2\pi \left( \frac{n_1}{L_1} \vec{e}_1 + \frac{n_2}{L_2} \vec{e}_2 + \frac{n_3}{L_3} \vec{e}_3 \right) .$$

Uslov da vektor  $\vec{k}$  pripada redukovanim području je da njegove komponente budu odabrane tako da važi:

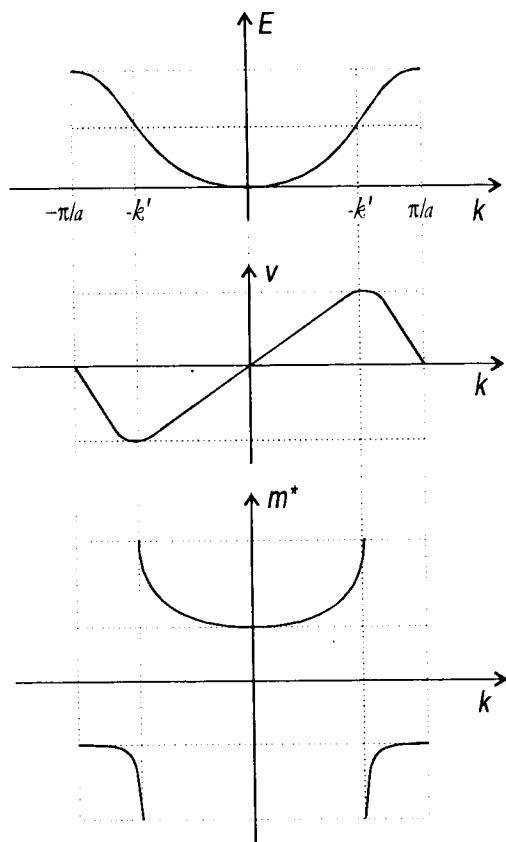
$$-\frac{\pi}{a} < k_i < \frac{\pi}{a}; \quad i = x, y, z .$$

Za ovakvu rešetku tenzor recipročne efektivne mase je simetričan i ima medjusobno jednake dijagonalne komponete. Ukoliko se ta osobina tenzora primeni na izraz (2.20), odnosno (2.1), dobija se disperzioni zakon slobodnog elektrona, ali sa efektivnom masom  $m^*$

$$E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} . \quad (2.22)$$

Smisao uvođenja efektivne mase sastoji se u tome da se složeni zakoni kretanja u kristalu mogu formalno svesti na zakone klasične fizike. Znači, podsrestvom efektivne mase je uračunato rezultujuće dejstvo periodičnog električnog polja na elektron.

Zavisno od zakrivljenosti energetske površine, efektivna masa može da bude negativna ili pozitivna (što odgovara elektronima ili šupljinama, respektivno). Ubrzanje nosioca nanelektrisanja u kristalnoj rešetki odredjeno je, ne slobodnom elektronskom masom, već skupom veličina (2.20) koje se menjaju pomeranjem elektronskog stanja u prostoru talasnog vektora. Efektivna masa elementarnih nosioca nanelektrisanja je pozitivna oko sredine, a negativna pri kraju redukovanih područja. Ovo može da se prikaže crtežom (slika 2.3).



**Slika 2.3:** Promena energije, brzine i efektivne mase u  $k$ -prostoru

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 Briluebove 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  $k = +\frac{\pi}{a}$  (odnosno  $p = +\pi\hbar/a$ ) njegov kvaziimpuls se skokovito menja u suprotni ( $p = -\pi\hbar/a$ ). Takvu skokovitu promenu doživljava i brzina elektrona: pozitivnim vrednostima brzine odgovara kretanje elektrona u pravcu delovanja sile udesno, a negativnim nasuprot delovanju sile uлево. Dakle, kretanje elektrona u kristalu ima oscilatorni karakter. Oblasći negativne mase odgovaraju situaciji da se elektron usporava iako na njega deluje spoljašnja sila sa težnjom da mu poveća brzinu ( $k' < k < \frac{\pi}{a}$ ), odnosno ubrzava iako spoljašnja sila teži da mu smanji brzinu ( $-\frac{\pi}{a} < k < -k'$ ). Medjutim, u toj oblasti faznog  $k$ -prostora negativno nanelektrisani elektron negativne mase može da se tretira kao pozitivno nanelektrisana čestica pozitivne mase - šupljina<sup>5</sup> koja se kreće u skladu sa delovanjem polja:  $+e\vec{E}$ . Dakle, kretanje elektrona na krajevima zona može da se posmatra i kao kretanje pozitivno nanelektrisanih šupljina.

<sup>5</sup>Čestica koja poseduje isti iznos nanelektrisanja i mase kao elektron samo suprotnog predznaka.

## 2.4. Zakon disperzije

Sada ćemo razmotriti neka svojstva elektronskog podsistema idealnog beskonačnog kristala polazeći od hamiltonijana slobodnih elektrona koji u konfiguracionom prostoru ima oblik:

$$H = \sum_{\vec{n}} \Delta_{\vec{n}} a_{\vec{n}}^+ a_{\vec{n}} - \sum_{\vec{n}, \vec{m}} W_{\vec{n}, \vec{m}} a_{\vec{n}}^+ a_{\vec{m}}, \quad (2.23)$$

gde su  $a_{\vec{n}}^+$  i  $a_{\vec{n}}$  - kreacioni i anihilacioni operatori elektrona na čvoru  $\vec{n}$  reštke. 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 (2.24) ekvivalentan hamiltonijanu elektronskog gasa u aproksimaciji efektivne mase:

$$H = \sum_{\vec{k}} E_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}}, \quad E_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2 m^*}. \quad (2.24)$$

Translaciona invarijantnost posmatranog idealnog kristala nameće periodičnost hamiltonijana (2.24) koja ima za posledicu da su:

$$\Delta_{\vec{n}} = \Delta, \quad W_{\vec{n}, \vec{m}} = W_{\vec{m}, \vec{n}} \equiv W; \quad \forall (\vec{n}, \vec{m}) \quad (2.25)$$

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

$$\begin{aligned} H = & \Delta \sum_{n_x n_y n_z} a_{n_x n_y n_z}^+ a_{n_x n_y n_z} - W \sum_{n_x n_y n_z} a_{n_x n_y n_z}^+ (a_{n_x+1, n_y n_z} + a_{n_x-1, n_y n_z} + \\ & + a_{n_x n_y+1, n_z} + a_{n_x n_y-1, n_z} + a_{n_x n_y n_z+1} + a_{n_x n_y n_z-1}). \end{aligned} \quad (2.26)$$

Svojstva posmatranog elektronskog sistema analiziraćemo pomoću antikomutatorske Grinove funkcije (videti Dodatak 5.1.)

$$G_{\vec{n}, \vec{m}}(t) = \Theta(t) \langle \{a_{\vec{n}}(t), a_{\vec{m}}^+(0)\} \rangle, \quad (2.27)$$

koja zadovoljava jednačinu kretanja:

$$i\hbar \frac{d}{dt} G_{\vec{n}, \vec{m}}(t) = i\hbar \delta_{\vec{n}, \vec{m}} \delta(t) + \Theta(t) \langle \{[a_{\vec{n}}, H], a_{\vec{m}}^+\} \rangle. \quad (2.28)$$

Za izračunavanje komutatora  $[a_{\vec{n}}, H]$  koristićemo standardne fermionske komutatorske relacije:

$$\{a_{\vec{n}}, a_{\vec{m}}^+\} = \delta_{\vec{n}, \vec{m}}, \quad \{a_{\vec{n}}, a_{\vec{m}}\} = \{a_{\vec{n}}^+, a_{\vec{m}}^+\} = 0. \quad (2.29)$$

Hamiltonian iz relacije (2.27) može da se napiše kao zbir:

$$H = H_1 - \sum_{\nu=2}^7 H_\nu, \quad (2.30)$$

gde su:

$$\begin{aligned} H_1 &= \Delta \sum_{m_x m_y m_z} a_{m_x m_y m_z}^+ a_{m_x m_y m_z}; & H_2 &= W \sum_{m_x m_y m_z} a_{m_x m_y m_z}^+ a_{m_x+1, m_y m_z} \\ H_3 &= W \sum_{m_x m_y m_z} a_{m_x m_y m_z}^+ a_{m_x-1, m_y m_z}; & H_4 &= W \sum_{m_x m_y m_z} a_{m_x m_y m_z}^+ a_{m_x m_y+1, m_z} \\ H_5 &= W \sum_{m_x m_y m_z} a_{m_x m_y m_z}^+ a_{m_x m_y-1, m_z}; & H_6 &= W \sum_{m_x m_y m_z} a_{m_x m_y m_z}^+ a_{m_x m_y m_z+1} \end{aligned}$$

$$H_7 = W \sum_{m_x m_y m_z} a_{m_x m_y m_z}^+ a_{m_x m_y m_z-1}$$

Drugi deo izraza na desnoj strani jednačine kretanja napisaćemo kao:

$$\Theta(t) \langle \{ [a_{\vec{n}}, H], a_{\vec{m}}^+ \} \rangle = F, \quad (2.31)$$

a komutator:

$$\hat{C} \equiv \hat{C}_{\vec{n}} \equiv [a_{\vec{n}}, H] = \hat{C}_1 - \sum_{\nu=2}^7 \hat{C}_\nu, \quad (2.32)$$

na osnovu čega dobijamo:

$$F \equiv F_{\vec{n} \vec{m}} \equiv \Theta(t) \langle \{ \hat{C}, a_{\vec{m}}^+ \} \rangle = F_1 - \sum_{\nu=2}^7 F_\nu. \quad (2.33)$$

Zatim se može preći na računanje komutatora  $\hat{C}_\nu$ :

$$\begin{aligned} \hat{C}_1 &= [a_{\vec{n}}, H_1] = \Delta \sum_{m_x m_y m_z} \left[ a_{n_x n_y n_z}, a_{m_x m_y m_z}^+ a_{m_x m_y m_z} \right] = \\ &= \Delta \sum_{m_x m_y m_z} \left[ a_{m_x m_y m_z}^+ \left( a_{n_x n_y n_z}, a_{m_x m_y m_z} - a_{m_x m_y m_z} a_{n_x n_y n_z} \right) + \right. \\ &\quad \left. \left( a_{n_x n_y n_z} a_{m_x m_y m_z}^+ - a_{m_x m_y m_z}^+ a_{n_x n_y n_z} \right) a_{m_x m_y m_z} \right] \end{aligned} \quad (2.34)$$

Na osnovu relacije (2.30) sledi:  $a_{n_x n_y n_z} a_{m_x m_y m_z} = -a_{m_x m_y m_z} a_{n_x n_y n_z}$ , i  $a_{m_x m_y m_z}^+ a_{n_x n_y n_z} = \delta_{n_x m_x} \delta_{n_y m_y} \delta_{n_z m_z} - a_{n_x n_y n_z} a_{m_x m_y m_z}^+$ , pa je:

$$\begin{aligned} \hat{C}_1 &= \Delta \sum_{m_x m_y m_z} \left[ a_{m_x m_y m_z}^+ 2 a_{n_x n_y n_z} a_{m_x m_y m_z} + \right. \\ &\quad \left. \left( 2 a_{n_x n_y n_z} a_{m_x m_y m_z}^+ - \delta_{n_x m_x} \delta_{n_y m_y} \delta_{n_z m_z} \right) a_{m_x m_y m_z} \right] = \\ &= \Delta \sum_{m_x m_y m_z} \left[ 2 \left( \delta_{n_x m_x} \delta_{n_y m_y} \delta_{n_z m_z} - a_{n_x n_y n_z} a_{m_x m_y m_z}^+ \right) + \right. \\ &\quad \left. \left( 2 a_{n_x n_y n_z} a_{m_x m_y m_z}^+ - \delta_{n_x m_x} \delta_{n_y m_y} \delta_{n_z m_z} \right) \right] a_{m_x m_y m_z} = \\ &= \Delta \sum_{m_x m_y m_z} a_{m_x m_y m_z} \delta_{n_x m_x} \delta_{n_y m_y} \delta_{n_z m_z}. \end{aligned}$$

Poznato je da  $\delta_{\vec{n} \vec{m}}$  „skida“ sumu po  $\vec{m} \equiv (m_x, m_y, m_z)$  i svako  $m_j \rightarrow n_j$ ,  $j = x, y, z$ , te se konačno dobija:

$$\hat{C}_1 = \Delta a_{n_x n_y n_z}.$$

Analognim računanjem kao za  $\hat{C}_1$  se dobijaju i ostale vrednosti komutatora  $\hat{C}_\nu$ , pomoću koji mogu da se napišu izrazi za svako  $F_\nu$  iz jednačine (2.34):

$$F_1 = \Theta(t) \langle \{\hat{C}_1, a_{\vec{m}}^+\} \rangle = \Delta \Theta(t) \langle \{a_{\vec{n}}, a_{\vec{m}}^+\} \rangle = \Delta G_{\vec{n}\vec{m}}(t),$$

gde izraz:  $\Theta(t) \langle \{a_{\vec{n}}, a_{\vec{m}}^+\} \rangle$  predstavlja Grinovu funkciju  $G_{\vec{n}\vec{m}}(t)$ . Ostale vrednosti veličina  $F_\nu$  izračunate su analognim postupkom. Njihovom zamenom u jednačinu kretanja (2.29) dobija se:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} G_{\vec{n},\vec{m}}(t) &= i\hbar \delta_{\vec{n}\vec{m}} \delta(t) + \Delta G_{\vec{n},\vec{m}}(t) - \\ &- W [G_{n_x+1,n_y n_z;\vec{m}}(t) + G_{n_x-1,n_y n_z;\vec{m}}(t) + G_{n_x n_y+1,n_z;\vec{m}}(t) + \quad (2.35) \\ &+ G_{n_x n_y-1,n_z;\vec{m}}(t) + G_{n_x n_y n_z+1;\vec{m}}(t) + G_{n_x n_y n_z-1;\vec{m}}(t)] . \end{aligned}$$

Pošto se radi o beskonačnoj strukturi, moguće je izvršiti potpuni vremensko-prostorni Furije transform Grinovih funkcija:

$$G_{\vec{n},\vec{m}}(t) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega G_{\vec{k}}(\omega) e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})-i\omega t}, \quad (2.36)$$

gde su  $N \equiv N_x N_y N_z$ ;  $a_x = a_y = a_z = a$ . Ako se još izvrše Furije transformacije Kronekerovih simbola i delta funkcije:

$$\delta_{\vec{n}\vec{m}} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})}; \quad \delta(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega t} \quad (2.37)$$

i izraz (2.37) diferencira po  $t$ :

$$\frac{d}{dt} G_{\vec{n},\vec{m}}(t) = -i\frac{\omega}{N} \sum_{\vec{k}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega G_{\vec{k}}(\omega) e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})-i\omega t}, \quad (2.38)$$

a zatim sve to zameni u jednačinu (2.36) dobija se:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi N} \sum_{\vec{k}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})-i\omega t} \{ -i\hbar + 2\pi [\hbar\omega - \Delta + W (e^{+iak_x} + e^{-iak_x}) + \\ + W (e^{+iak_y} + e^{-iak_y} + e^{+iak_z} + e^{-iak_z})] G_{\vec{k}}(\omega) \} = 0, \quad (2.39) \end{aligned}$$

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:

$$G_{\vec{k}}(\omega) = \frac{i}{2\pi} \frac{1}{\omega - \omega_{\vec{k}}} \equiv \frac{i\hbar}{2\pi} \frac{1}{E - E_{\vec{k}}} , \quad (2.40)$$

gde

$$E_{\vec{k}} = \hbar \omega_{\vec{k}} = \Delta - 2W (\cos ak_x + \cos ak_y + \cos ak_z) \quad (2.41)$$

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

$$E_{\vec{k}} = 4W \left( \sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y}{2} + \sin^2 \frac{ak_z}{2} \right) . \quad (2.42)$$

Poslednji izraz možemo napisati i u sledećem obliku:

$$\mathcal{E}_{\vec{k}} \equiv \frac{E_{\vec{k}}}{4W} = \mathcal{F}_{k_x k_y} + \mathcal{G}_{k_z} , \quad (2.43)$$

$$\mathcal{F}_{k_x k_y} = \sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y}{2} ; \quad \mathcal{G}_{k_z} = \sin^2 \frac{ak_z}{2} ,$$

koji će nam biti pogodniji zbog kasnije komparacije sa zakonom disperzije elektrona u film-strukturama.

### 3. ELEKTRONI U TANKIM FILMOVIMA

#### 3.1. Modelni hamiltonijan

Hamiltonijan vezanih elektrona u tankim kristalnim filmovima možemo formirati polazeći od „balkovskog“ hamiltonijana (2.24), odnosno (2.27), koji u aproksimaciji najbližih suseda ima razvijeni oblik:

$$\begin{aligned} H = & \sum_{n_x n_y n_z} \Delta_{n_x n_y n_z} a_{n_x n_y n_z}^+ a_{n_x n_y n_z} - \sum_{n_x n_y n_z} a_{n_x n_y n_z}^+ \times \\ & \times \left( W_{n_x n_y n_z; n_x+1, n_y, n_z} a_{n_x+1, n_y, n_z} + W_{n_x n_y n_z; n_x-1, n_y, n_z} a_{n_x-1, n_y, n_z} + \right. \\ & + W_{n_x n_y n_z; n_x n_y+1, n_z} a_{n_x n_y+1, n_z} + W_{n_x n_y n_z; n_x n_y-1, n_z} a_{n_x n_y-1, n_z} + \\ & \left. + W_{n_x n_y n_z; n_x n_y n_z+1} a_{n_x n_y n_z+1} + W_{n_x n_y n_z; n_x n_y n_z-1} a_{n_x n_y n_z-1} \right) . \end{aligned} \quad (3.1)$$

Pošto su granične površine filma uzete normalno na  $z$  - pravac, indeks sloja  $n_z$  u (3.1) - 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 translacijske 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 posede dve beskonačne granične površine paralelne  $XY$  ravnima i to za:  $z = 0$  i  $z = L$  (slika 3.1).

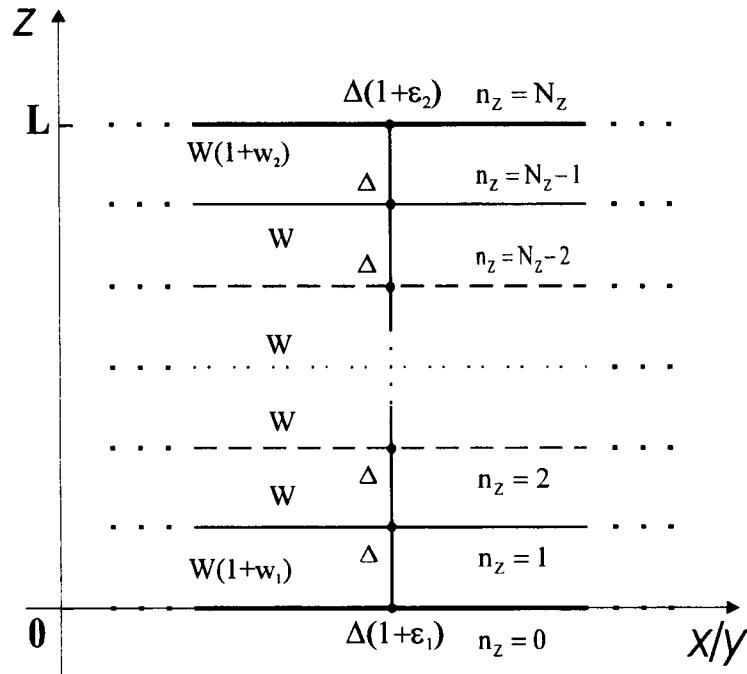
Zbog izmenjenih uslova na granicama filma, uzećemo da je:

$$\Delta_{n_x n_y 0} = \Delta (1 + \varepsilon_1) ; \quad \Delta_{n_x n_y N_z} = \Delta (1 + \varepsilon_2) , \quad (3.2)$$

gde je  $\Delta$  - energija elektrona na čvoru kod beskonačnog kristala. Površinski parametri  $\varepsilon_1$  i  $\varepsilon_2$  (koji mogu biti  $> 0$  i/ili  $< 0$ ) izražavaju relativnu promenu ove energije na granicama filma. Matrične elemente elektronskog preskoka sa sloja na sloj, možemo izraziti:

$$\begin{aligned} W_{n_x n_y n_z; n_x \pm 1, n_y, n_z} &= W_{n_x n_y n_z; n_x n_y \pm 1, n_z} \equiv W \\ W_{n_x n_y n_z; n_x n_y n_z+1}^{(0 < n_z < N_z-1)} &= W_{n_x n_y n_z; n_x n_y n_z-1}^{(1 < n_z < N_z)} \equiv W \\ W_{n_x n_y 0; n_x n_y 1} &= W(1 + w_1) ; \quad W_{n_x n_y N_z-1; n_x n_y N_z} = W(1 + w_2) \\ W_{n_x n_y 0; n_x n_y -1} &= W_{n_x n_y N_z; n_x n_y N_z+1} = 0 , \end{aligned} \quad (3.3)$$

gde je  $W$  - konstanta elektronskog transfera idealnog kristala. Površinski parametri  $w_1$ ,  $w_2$  (mogu biti  $> 0$  i/ili  $< 0$ ) opisuju relativnu promenu matričnog elementa elektronskog transfera ( $W$ ) izmedju graničnih i njima susednih slojeva filma.



**Slika 3.1:** Presek modela kristalnog filma u  $X(Y)Z$  ravni

Elektronski hamiltonijan tankih kristalnih filmova možemo sada napisati u obliku:

$$H = H_z + H_p ,$$

$$\begin{aligned}
 H_z &= \sum_{m_x m_y} \sum_{m_z=1}^{N_z-1} a_{m_x m_y m_z}^+ \left[ \Delta a_{m_x m_y m_z} - W (a_{m_x+1, m_y m_z} + a_{m_x-1, m_y m_z} + \right. \\
 &\quad \left. + a_{m_x m_y+1, m_z} + a_{m_x m_y-1, m_z} + a_{m_x m_y m_z+1} + a_{m_x m_y m_z-1}) \right] ; \\
 H_p &= \sum_{m_x m_y} \left\{ a_{m_x m_y 0}^+ [(1 + \varepsilon_1) \Delta a_{m_x m_y 0} - W(1 + w_1) a_{m_x m_y 1}] + \right. \\
 &\quad + a_{m_x m_y N_z}^+ [(1 + \varepsilon_2) \Delta a_{m_x m_y N_z} - W(1 + w_2) a_{m_x m_y N_z-1}] - \\
 &\quad - W a_{m_x m_y 0}^+ (a_{m_x+1, m_y 0} + a_{m_x-1, m_y 0} + a_{m_x m_y+1, 0} + a_{m_x m_y-1, 0}) - \\
 &\quad \left. - W a_{m_x m_y N_z}^+ (a_{m_x+1, m_y N_z} + a_{m_x-1, m_y N_z} + a_{m_x m_y+1, N_z} + a_{m_x m_y-1, N_z}) \right\} . \tag{3.4}
 \end{aligned}$$

### 3.2. Jednačine kretanja

Pomoću tako prethodno definisanog hamiltonijana, najpre ćemo izračunati jednočestične antikomutatorske Grinove funkcije:

$$G_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z}(t) = \Theta(t) \langle \{ a_{n_x n_y n_z}(t), a_{m_x m_y m_z}^+(0) \} \rangle, \quad (3.5)$$

koje određuju ravnotežna svojstva elektrona u tankim kristalnim filmovima.

Elektronske Grinove funkcije se mogu izračunati mikroteorijskom procedurom na sličan način kao što je uradjeno u prethodnoj glavi. Potrebno je pre svega formirati jednačine kretanja diferenciranjem prethodnog izraza po vremenu:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} G_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z}(t) &= i\hbar \delta(t) \delta_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z} + \\ &+ \Theta(t) \langle \{ [a_{n_x n_y n_z}(t), H], a_{m_x m_y m_z}^+(0) \} \rangle, \end{aligned} \quad (3.6)$$

i izračunati odgovarajuće komutatore (istim postupkom kao i za idealne strukture), nakon čega dobijamo:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} G_{\vec{n}, \vec{m}}(t) &= i\hbar \delta_{\vec{n}, \vec{m}} \delta(t) + \Delta G_{\vec{n}, \vec{m}}(t) - \\ &- W [G_{n_x+1, n_y n_z; \vec{m}}(t) + G_{n_x-1, n_y n_z; \vec{m}}(t) + G_{n_x n_y+1, n_z; \vec{m}}(t) + \\ &+ G_{n_x n_y-1, n_z; \vec{m}}(t) + G_{n_x n_y n_z+1; \vec{m}}(t) + G_{n_x n_y n_z-1; \vec{m}}(t)]. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Uvodjenjem vremenske i delimične prostorne Furije-transformacije za Grinove funkcije,

$$G_{n_x n_y n_z; \vec{m}}(t) = \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i[k_x a_x(n_x - m_x) + k_y a_y(n_y - m_y)]} e^{-i\omega t} G_{n_z; m_z}(k_x, k_y; \omega) \quad (3.8)$$

(gde je:  $n_z = 0, 1, 2, \dots, N_z$  i  $a_x = a_y = a$ ) i

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

te zamenom gornjih transformacija u jednačinu kretanja (3.7) dobija se:

$$\begin{aligned} &\frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega t} e^{ia[k_x(n_x - m_x) + k_y(n_y - m_y)]} \{ [\hbar\omega - \Delta + \\ &+ W (e^{iak_x} + e^{-iak_x} + e^{iak_y} + e^{-iak_y})] G_{n_z; m_z}(k_x k_y; \omega) + \\ &+ W [G_{n_z+1; m_z}(k_x k_y; \omega) + G_{n_z-1; m_z}(k_x k_y; \omega)] - \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{n_z m_z} \} = 0, \end{aligned}$$

odnosno:

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - \Delta + 2W(\cos ak_x + \cos ak_y)] G_{n_z;m_z}(k_x k_y; \omega) + \\ & + W [G_{n_z+1;m_z}(k_x k_y; \omega) + G_{n_z-1;m_z}(k_x k_y; \omega)] = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{n_z m_z}, \end{aligned} \quad (3.9)$$

koja važi za slučaj  $1 \leq n_z \leq N_z - 1$ . Za slučaj  $n_z = 0$ , jednačina kretanja ima oblik:

$$\begin{aligned} & i\hbar \frac{d}{dt} G_{n_x n_y 0; \vec{m}}(t) = i\hbar \delta_{n_x m_x} \delta_{n_y m_y} \delta_{0, m_z} \delta(t) + \\ & + (1 + \varepsilon_1) \Delta G_{n_x n_y 0; \vec{m}}(t) - (1 + w_1) W G_{n_x n_y 1; \vec{m}} - \\ & - W [G_{n_x+1, n_y 0; \vec{m}}(t) + G_{n_x-1, n_y 0; \vec{m}}(t) + G_{n_x n_y +1, 0; \vec{m}}(t) + G_{n_x n_y -1, 0; \vec{m}}(t)]. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Uvodjenjem Furije-transformacija, uz uslov  $n_z = 0$ , dobija se

$$\begin{aligned} & \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega t} e^{ia[k_x(n_x-m_x)+k_y(n_y-m_y)]} \{2\pi [\hbar\omega - (1 + \varepsilon_1) \Delta + \\ & + W (e^{ik_x} + e^{-ik_x} + e^{ik_y} + e^{-ik_y})] G_{0; m_z}(k_x k_y; \omega) + \\ & + (1 + w_1) W G_{1; m_z}(k_x k_y; \omega) - \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{0, m_z}\} = 0, \end{aligned}$$

odnosno:

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - (1 + \varepsilon_1) \Delta + 2W(\cos ak_x + \cos ak_y)] G_{0; m_z}(k_x k_y; \omega) + \\ & + (1 + w_1) W G_{1; m_z}(k_x k_y; \omega) = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{0, m_z}. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Za slučaj  $n_z = 1$ , jednačina kretanja će biti:

$$\begin{aligned} & i\hbar \frac{d}{dt} G_{n_x n_y 1; \vec{m}}(t) = i\hbar \delta_{n_x m_x} \delta_{n_y m_y} \delta_{1, m_z} \delta(t) + \Delta G_{n_x n_y 1; \vec{m}}(t) - \\ & - (1 + w_1) W G_{n_x n_y 0; \vec{m}} - W [G_{n_x+1, n_y 1; \vec{m}}(t) + G_{n_x-1, n_y 1; \vec{m}}(t) + \\ & + G_{n_x n_y +1, 1; \vec{m}}(t) + G_{n_x n_y -1, 1; \vec{m}}(t) + G_{n_x n_y 2; \vec{m}}(t)]. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Analognim postupkom kao u prethodnom slučaju, preko Furije-transformacija (3.8), dobija se:

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - \Delta + 2W(\cos ak_x + \cos ak_y)] G_{1; m_z}(k_x k_y; \omega) + \\ & + W [G_{2; m_z}(k_x k_y; \omega) + (1 + w_1) G_{0; m_z}(k_x k_y; \omega)] = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{1, m_z}, \end{aligned} \quad (3.13)$$

dok se za slučaj  $n_z = N_z - 1$ , istim proračunom dobija:

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - \Delta + 2W(\cos ak_x + \cos ak_y)] G_{N_z-1;m_z}(k_x k_y; \omega) + \\ & + W [G_{N_z-2;m_z}(k_x k_y; \omega) + (1 + w_1) G_{N_z;m_z}(k_x k_y; \omega)] = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{N_z-1,m_z}. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Za slučaj  $n_z = N_z$ , jednačina kretanja je:

$$\begin{aligned} & i\hbar \frac{d}{dt} G_{n_x n_y N_z; \vec{m}}(t) = i\hbar \delta_{n_x m_x} \delta_{n_y m_y} \delta_{N_z m_z} \delta(t) + (1 + \varepsilon_2) \Delta G_{n_x n_y N_z; \vec{m}}(t) - \\ & - (1 + w_2) W G_{n_x n_y N_z-1; \vec{m}}(t) - W [G_{n_x+1, n_y N_z; \vec{m}}(t) + G_{n_x-1, n_y N_z; \vec{m}}(t) + \\ & + G_{n_x n_y+1, N_z; \vec{m}}(t) + G_{n_x n_y-1, N_z; \vec{m}}(t)], \end{aligned}$$

odakle se, zamenom Furije-transformacija (3.8), dobija:

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - (1 + \varepsilon_2)\Delta + 2W(\cos ak_x + \cos ak_y)] G_{N_z;m_z}(k_x k_y; \omega) + \\ & + (1 + w_2) W G_{N_z-1;m_z}(k_x k_y; \omega) = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{N_z m_z}. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Sada možemo formirati sistem od jednačina (3.9), (3.11) i (3.13-15). Svaku od ovih jednačina delimo sa  $W$ , pri čemu uvodimo oznake:

$$\begin{aligned} \varrho &= \hbar \frac{\omega}{W} - \frac{\Delta}{W} + 2(\cos ak_x + \cos ak_y); \\ G_{n_z;m_z}(k_x, k_y; \omega) &\equiv G_{n_z, m_z}; \quad \mathcal{K} = \frac{i\hbar}{2\pi W}. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Pomenuti sistem jednačina ima onda oblik:

$$\begin{aligned} (\varrho - \varepsilon_1) G_{0,m_z} + (1 + w_1) G_{1,m_z} &= \mathcal{K} \delta_{0,m_z} \\ (1 + w_1) G_{0,m_z} + \varrho G_{1,m_z} + G_{2,m_z} &= \mathcal{K} \delta_{1,m_z} \\ G_{1,m_z} + \varrho G_{2,m_z} + G_{3,m_z} &= \mathcal{K} \delta_{2,m_z} \end{aligned}$$

$$G_{n_z-1,m_z} + \varrho G_{n_z,m_z} + G_{n_z+1,m_z} = \mathcal{K} \delta_{n_z,m_z} \quad (3.17)$$

$$\begin{aligned} G_{N_z-3,m_z} + \varrho G_{N_z-2,m_z} + G_{N_z-1,m_z} &= \mathcal{K} \delta_{N_z-2,m_z} \\ G_{N_z-2,m_z} + \varrho G_{N_z-1,m_z} + (1 + w_2) G_{N_z,m_z} &= \mathcal{K} \delta_{N_z-1,m_z} \\ (1 + w_2) G_{N_z-1,m_z} + (\varrho - \varepsilon_2) G_{N_z,m_z} &= \mathcal{K} \delta_{N_z,m_z} \end{aligned}$$

Sistem sadrži  $N_z + 1$  nepoznatih:  $G_{0;m_z}$ ,  $G_{1;m_z}$ ,  $G_{2;m_z}$ , ...,  $G_{N_z;m_z}$ , gde je:

$$G_{n_z;m_z} = \frac{D_{n_z}}{D_{N_z+1}}.$$

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, što znači da mora biti:

$$D_{N_z+1} \equiv 0, \quad (3.18)$$

$$D_{N_z+1}(\varrho) = \begin{vmatrix} \varrho - \varepsilon_1 & 1 + w_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 1 + w_1 & \varrho & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \varrho & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \ddots & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & \varrho & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & \varrho & 1 + w_2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 + w_2 & \varrho - \varepsilon_2 \end{vmatrix}_{N_z+1} \quad (3.19)$$

$D_{N_z+1}(\varrho)$  predstavlja determinantu sistema i može da se napiše u razvijenom obliku:

$$\begin{aligned} D_{N_z+1}(\varrho) = & (\varrho - \varepsilon_1)(\varrho - \varepsilon_2) C_{N_z-1} - [(1 + w_1)^2(\varrho - \varepsilon_2) + \\ & + (1 + w_2)^2(\varrho - \varepsilon_1)] C_{N_z-2} + (1 + w_1)^2(1 + w_2)^2 C_{N_z-3}, \end{aligned} \quad (3.20)$$

gde je  $C_{N_z}$  karakteristični Čebiševljev polinom druge vrste (videti Dodatak 5.3.).

### 3.3. Zakon disperzije

Uslov (3.18), može se rešiti analitički (koji je dat u Dodatku 5.2) kada je:  $\varepsilon_{1/2} = w_{1/2} = 0$  što odgovara film-strukturi koja je „isečena” iz beskonačne. U ostalim slučajevima rešava se numerički za zadate verdnosti parametara  $\varepsilon_{1/2}$  i  $w_{1/2}$  pri čemu je  $\varepsilon_{1/2} \approx w_{1/2}$  što se dobija iz uslova  $\Delta_\varepsilon = 6W_w$ .

Rešavanjem jednačine (3.20), odnosno uslova (3.18) po promenljivoj  $\varrho$  iz jednačine (3.16) se dobija zakon disperzije u sledećem obliku:

$$\mathcal{E}_k(\nu) \equiv \mathcal{F}_{k_x k_y} + \mathcal{G}_{k_z}(\nu), \quad (3.21)$$

$$\mathcal{F}_{k_x k_y} = \sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y}{2}; \quad \mathcal{G}_{k_z}(\nu) = \frac{\varrho_\nu + 2}{4}.$$

Rezultati numeričke procedure prikazani su u tabelama (3.1-3), gde su analizirane energije ( $\frac{\hbar\omega}{W}$ ) elektrona u zavisnosti od graničnih parametara za petoslojni film ( $N_z = 4$ ) pri  $k_x = k_y = 0$ .

1		SPEKTRI ELEKTRONA U (PETOSLOJNOM $N_z = 4$ ) FILMU						
Granični parametri				Redukovane energije (4 $\mathcal{E}$ )				
$\varepsilon_1$	$w_1$	$\varepsilon_2$	$w_2$	$E_1$	$E_2$	$E_3$	$E_4$	$E_5$
$\varepsilon_1 = -0.5$	$w_1 = -0.6$	$\varepsilon_2 = -0.5$	-0.6	0.51	1.28	1.54	2.22	3.46
			-0.5	0.48	1.24	1.55	2.27	3.47
			-0.4	0.45	1.19	1.56	2.32	3.48
		$\varepsilon_2 = 0.0$	-0.1	0.40	1.22	1.67	2.62	3.59
			0.0	0.37	1.19	1.66	2.69	3.63
			0.1	0.32	1.15	1.64	2.71	3.67
		$\varepsilon_2 = 0.5$	0.4	0.25	1.15	1.68	2.93	3.99
			0.5	0.20	1.12	1.66	2.95	4.07
			0.6	0.14	1.10	1.65	2.96	4.15
	$w_1 = -0.5$	$\varepsilon_2 = -0.5$	-0.6	0.48	1.24	1.55	2.27	3.47
			-0.5	0.46	1.19	1.56	2.31	3.48
			-0.4	0.44	1.15	1.57	2.36	3.49
		$\varepsilon_2 = 0.0$	-0.1	0.38	1.16	1.71	2.65	3.60
			0.0	0.35	1.12	1.70	2.70	3.64
			0.1	0.31	1.09	1.68	2.74	3.68
		$\varepsilon_2 = 0.5$	0.4	0.24	1.08	1.72	2.96	3.99
			0.5	0.19	1.05	1.71	2.98	4.07
			0.6	0.13	1.03	1.70	2.99	4.15
	$w_1 = -0.4$	$\varepsilon_2 = -0.5$	-0.6	0.45	1.19	1.56	2.32	3.48
			-0.5	0.44	1.15	1.57	2.36	3.49
			-0.4	0.41	1.10	1.58	2.40	3.51
		$\varepsilon_2 = 0.0$	-0.1	0.36	1.10	1.75	2.68	3.61
			0.0	0.33	1.06	1.73	2.73	3.65
			0.1	0.29	1.03	1.72	2.77	3.69
		$\varepsilon_2 = 0.5$	0.4	0.23	1.01	1.77	2.99	3.99
			0.5	0.18	0.98	1.76	3.01	4.07
			0.6	0.13	0.96	1.74	3.02	4.15

Tabela 3.1: Spektri elektrona u tankom filmu za  $\varepsilon_1 = -0.5$

2		SPEKTRI ELEKTRONA U (PETOSLOJNOM $N_z = 4$ ) FILMU						
Granični parametri				Redukovane energije (4 $\mathcal{E}$ )				
$\varepsilon_1$	$w_1$	$\varepsilon_2$	$w_2$	$E_1$	$E_2$	$E_3$	$E_4$	$E_5$
0.0	-0.1	-0.5	-0.6	0.40	1.22	1.67	2.62	3.59
			-0.5	0.38	1.16	1.71	2.65	3.60
			-0.4	0.36	1.10	1.75	2.68	3.61
		0.0	-0.1	0.32	1.10	2.00	2.90	3.68
			0.0	0.29	1.05	2.00	2.95	3.71
			0.1	0.26	1.01	2.00	2.99	3.74
		0.5	0.4	0.21	0.98	2.09	3.21	4.01
			0.5	0.16	0.95	2.08	3.23	4.09
			0.6	0.11	0.92	2.07	3.24	4.16
	0.0	-0.5	-0.6	0.37	1.19	1.66	2.69	3.63
			-0.5	0.35	1.12	1.70	2.70	3.64
			-0.4	0.33	1.06	1.73	2.73	3.65
		0.0	-0.1	0.30	1.05	2.00	2.95	3.71
			0.0	0.27	1.00	2.00	3.00	3.73
			0.1	0.24	0.95	2.00	3.05	3.76
		0.5	0.4	0.19	0.93	2.10	3.27	4.02
			0.5	0.14	0.89	2.09	3.29	4.09
			0.6	0.09	0.85	2.08	3.31	4.17
	0.1	-0.5	-0.6	0.32	1.15	1.64	2.71	3.67
			-0.5	0.31	1.09	1.68	2.74	3.68
			-0.4	0.29	1.03	1.72	2.77	3.69
		0.0	-0.1	0.26	1.01	2.00	2.99	3.74
			0.0	0.24	0.95	2.00	3.05	3.76
			0.1	0.21	0.90	2.00	3.10	3.79
		0.5	0.4	0.16	0.87	2.11	3.34	4.03
			0.5	0.12	0.83	2.10	3.36	4.10
			0.6	0.08	0.79	2.09	3.37	4.17

**Tabela 3.2:** Spektri elektrona u tankom filmu za  $\varepsilon_1 = 0.0$

3   SPEKTRI ELEKTRONA U (PETOSLOJNOM $N_z = 4$ ) FILMU								
Granični parametri			Redukovane energije (4 $\mathcal{E}$ )					
$\varepsilon_1$	$w_1$	$\varepsilon_2$	$w_2$	$E_1$	$E_2$	$E_3$	$E_4$	$E_5$
0.4	0.4	-0.5	-0.6	0.25	1.15	1.68	2.93	3.99
			-0.5	0.24	1.08	1.72	2.96	3.99
			-0.4	0.23	1.01	1.77	2.99	3.99
		0.0	-0.1	0.21	0.98	2.09	3.21	4.01
			0.0	0.19	0.93	2.10	3.27	4.02
			0.1	0.16	0.87	2.11	3.34	4.03
	0.5	0.5	0.4	0.12	0.83	2.24	3.67	4.14
			0.5	0.08	0.78	2.24	3.72	4.18
			0.6	0.04	0.74	2.23	3.75	4.23
		0.5	-0.6	0.20	1.12	1.66	2.95	4.07
			-0.5	0.19	1.05	1.71	2.98	4.07
			-0.4	0.18	0.98	1.76	3.01	4.07
0.5	0.5	0.0	-0.1	0.16	0.95	2.08	3.23	4.09
			0.0	0.14	0.89	2.09	3.29	4.09
			0.1	0.12	0.83	2.10	3.36	4.10
		0.5	0.4	0.08	0.78	2.24	3.72	4.18
			0.5	0.05	0.73	2.23	3.77	4.21
			0.6	0.02	0.68	2.22	3.82	4.26
	0.6	-0.5	-0.6	0.14	1.10	1.65	2.96	4.15
			-0.5	0.13	1.03	1.70	2.99	4.15
			-0.4	0.13	0.96	1.74	3.02	4.15
		0.0	-0.1	0.11	0.92	2.07	3.24	4.16
			0.0	0.09	0.85	2.08	3.31	4.17
			0.1	0.08	0.79	2.09	3.37	4.17
		0.5	0.4	0.04	0.74	2.23	3.75	4.23
			0.5	0.02	0.68	2.22	3.82	4.26
			0.6	-0.01	0.63	2.22	3.87	4.30

**Tabela 3.3:** Spektri elektrona u tankom filmu za  $\varepsilon_1 = 0.5$

### 3.4. Elektronska stanja

Analiza dobijenih rezultata pokazuje sledeći uticaj graničnih parametara.

1. Povećanjem parametara  $\varepsilon_{1/2}$ , ceo spektar se pomera ka višim vrednostima energija, pa čak može da izadje i van najviše balkovske granice.
2. Povećanjem parametara  $w_{1/2}$  energetski spektar elektrona se širi, prema ili van granica energetske zone idealnog kristala.
3. Pogodnim izborom parametara spektar mogućih energetskih podnivoa može da „napusti“ balkovske granice.
4. Pored „sužene“ energetske zone (redukovane energije  $0 < 4\mathcal{E} < 4$ ), što je prikazano na slici 3.2-4 gore, kada se ne pojavljuju lokalizovana energetska stanja već spektar poseduje gornji i donji energetski gep (videti Dodatak 5.2. i 5.3.), zona dozvoljenih elektronskih energija može da se proširi i van balkovskih granica. Tada se pojavljuju i **lokalizovana** elektronska stanja (samo jedno, što je prikazano na slici 3.2-4 levo dole, ili dva, slika 3.2-4 desno dole<sup>6</sup>).

Na osnovu toga sledi da će najviša energija u spektru izaći iz energetske zone masivnog kristala za veće vrednosti parametara  $\varepsilon_{1/2}$  i  $w_{1/2}$ , tj. pojaviće se lokalizovana stanja elektrona. To se vidi iz tabele 3.3 naročito za  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0.5$  i  $w_1 = w_2 = 0.6$  kada je najviša elektronska energija  $4\mathcal{E} = 4.30$  (zadnja vrsta u tabeli 3.3).

Takodje zbog velikog širenja spektra elektrona pri  $w_1 = w_2 = 0.6$  i pored toga što je spektar pomeren ka višim energijama (zbog  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0.5$ ), uočava se da je minimalna energija elektrona manja od nule, tj. javlja se lokalizovano stanje sa energijom ispod energetske zone masivnog kristala.

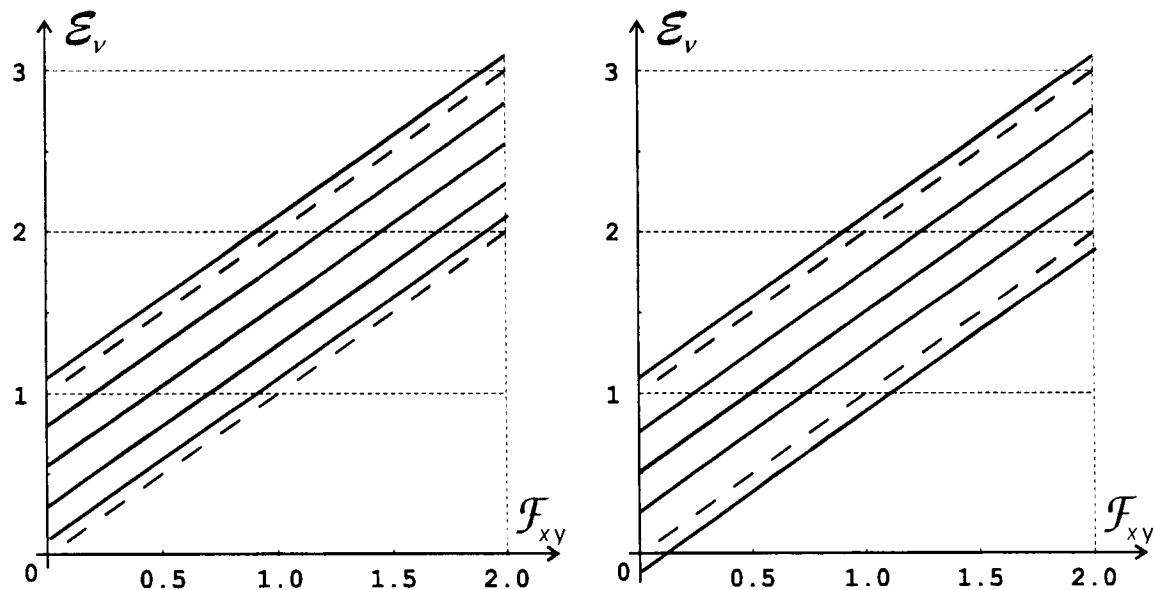
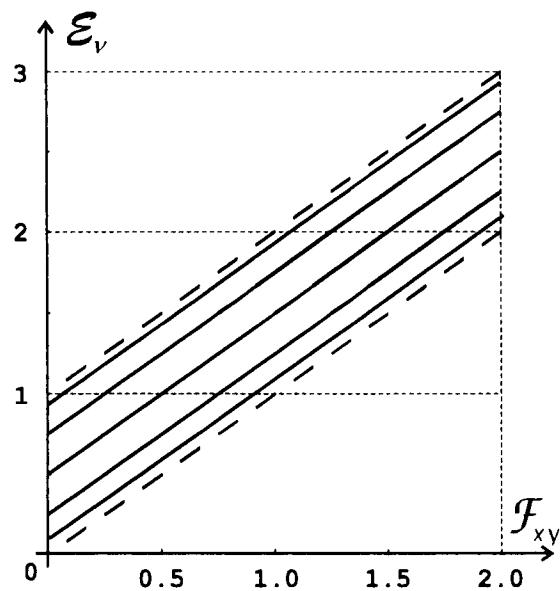
U želji da ispitamo zavisnost energije lokalizovanih stanja elektrona od debljine filma analizirali smo ponašanje veličine redukovanih energija ( $4\mathcal{E}$ ) od  $N_z$  u karakterističnom slučaju  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0.5$  i  $w_1 = w_2 = 0.6$  što je prikazano u tabeli 3.4.

LOKALIZOVANA STANJA		
$N_z$	$E_1$	$E_{N_z+1}$
4	-0.0126	4.2962
9	-0.0055	4.1953
14	-0.0036	4.1821
19	-0.0027	4.1803

**Tabela 3.4:** Zavisnost energije lokalizovanih stanja od  $N_z$

Kompletna analiza ove zavisnosti ( $N_z > 19$ ) nije mogla da bude sprovedena zbog ograničenosti kapaciteta memorije računara. Analizom podataka iz tabele 3.4 vidi se da sa povećanjem debljine filma energije lokalizovanih elektronskih stanja teže granicama energetske zone idealnog kristala.

<sup>6</sup>Broj lokalizovanih stanja nije ograničen na najviše dva, jer se povećanjem debljine filma mogu javiti još neka. Ovo su pokazale naknadne numeričke analize, ali zbog problema sa kapacitetom računarske memorije ovaj proračun nije doveden do kraja.



Slika 3.2-4: Energetski spektri elektrona tankog filma:

- unutar balkovskih granica (slika gore),
- pojava lokalizovanog stanja elektrona (levo dole),
- pojava lokalizovanih stanja elektrona (desno dole).

## 4. Z A K L J U Č A K

U radu su istraženi i analizirani energetski spektri (moguća energetska stanja) elektrona u kristalnim, idealnim beskonačnim i film strukturama, sa primitivnom kubnom rešetkom, na osnovu čega se došlo do sledećih važnijih rezultata.

1. Ove analize su pokazale bitne razlike u zakonu disperzije elektrona u pomenuta dva sistema, kao isključive posledice postojanja granica film-struktura, u kojima elektronski spektri poseduju dva energetska gepa.
2. Postojanje graničnih uslova ima za posledicu promenu širine energetske zone elektrona. U odnosu na zonu dozvoljenih energija idealnih struktura sa praktično kontinualnim rasporedom, zona elektronskih dozvoljenih energija u filmu je izrazito diskretna.
3. Uticaj graničnih parametara  $\varepsilon_{1/2}$  manifestuje se tako da sa njihovim povećanjem dolazi do pomeranja celog spektra ka višim vrednostima energija. Sa druge strane, povećanjem parametara  $w_{1/2}$  zona dozvoljenih elektronskih energija u filmu se širi prema granicama balkovske energetske zone.
4. Za zadate vrednosti graničnih parametara energetska zona elektrona je uža od balkovske, odnosno spektar elektrona poseduje jedan donji i/ili jedan gornji energetski gep. Posledica postojanja donjeg energetskog gepa može da se tumači na sledeći način: on odgovara energiji osnovnog stanja elektronskog sistema i predstavlja najmanju energiju koju treba uložiti da bi u filmu egzistirao elektronski gas. Sve do te energije elektroni se mogu nalaziti samo u nekim od vezanih stanja. S druge strane, to možemo tumačiti i tako da se u film-strukturama, za veličinu minimalnog energetskog gepa, „podigne“ Fermijev nivo. Samo elektroni sa energijama većim od ove minimalne, mogu da učestvuju u transportnim i ostalim fizički interesantnim procesima.
5. Za neke vrednosti pomenutih parametara energetska zona elektrona izlazi van zone elektronskih energija neograničenog kristala. U tom slučaju pojavljuju se lokalizovana elektronska stanja. Energije ovih stanja zavise od debljine filma - povećanjem debljine filma teže granicama balkovske energetske zone, čime zapravo prestaju da budu lokalizovana stanja. Uočljiva je i izražena zavisnost veličine energije lokalizovanih stanja elektrona od vrednosti graničnih energetskih parametara. Zbog toga se balkovske energije mogu dobiti samo u kompletном termodinamičkom limesu koji podrazumeva istrovemeni prelaz:  $\varepsilon_{1/2} \rightarrow 0$ ,  $w_{1/2} \rightarrow 0$  i  $L \rightarrow \infty$ .

## 5. DODATAK:

### Grinove funkcije i Čebiševljevi polinomi

#### 5.1. Metod Grinovih funkcija

Poznavanje Grinovih funkcija omogućava nalaženje energije osnovnog stanja sistema, spektra i vrste elementarnih pobudjenja, zatim, termodinamička svojstva u ravnotežnim i neravnotežnim stanjima posmatranog sistema.

Veoma bitan zadatak statističke fizike je nalaženje srednjih vrednosti dinamičkih veličina. Za veličinu  $\hat{A}(x, t)$  srednja vrednost se definiše kao:

$$\langle \hat{A}(x, t) \rangle_t = \text{Sp} \langle \hat{A}(x, t) \hat{\varrho}_t \rangle, \quad (5.1)$$

gde je:

$$\hat{\varrho}_t = e^{\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}} \hat{S}(t, t_o) e^{-\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}} \quad (5.2)$$

neravnotežni statistički operator, a  $\varrho_o$  - ravnotežni statistički operator. Za izračunavanje neravnotežnih srednjih vrednosti najpogodnije je koristiti ravnotežni operator velikog kanoničkog ansambla:

$$\hat{\varrho}_0 = e^{(\phi + \mu \hat{N}_o - \hat{N}_o)/\theta}$$

jer je velika kanonička raspodela najopštija (ona uključuje zakone održanja srednje energije i srednjeg broja čestica). Ako se (5.1) zameni u (5.2) i izvrše dve ciklične permutacije operatora, dobija se:

$$\text{Sp} \langle \hat{A}(x, t) \hat{\varrho}_t \rangle = \text{Sp} \left\{ \hat{S}^{-1}(t, t_o) e^{-\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}} \hat{A}(x, t) e^{\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}} \hat{S}(t, t_o) \hat{\varrho}_o \right\},$$

tj.:

$$\langle \hat{A}(x, t) \rangle_t = \langle \hat{S}^{-1}(t, t_o) \hat{A}(x, t) \hat{S}(t, t_o) \rangle_0 \quad (5.3)$$

gde je

$$\hat{A}(x, t) = \exp\left(-\frac{H_0 t}{i\hbar}\right) \hat{A}(x, t) \exp\left(\frac{H_0 t}{i\hbar}\right).$$

Šredingerov operator  $\hat{A}(x, t)$ , napisan u reprezentaciji interakcije. Pisanjem  $\langle \dots \rangle_t$  označene su neravnotežne srednje vrednosti, a  $\langle \dots \rangle_0$  ravnotežne srednje vrednosti.  $\hat{S}(t, t_0)$  je unitarni operator, tzv. matrica rasejanja:

$$\hat{S}(t, t_0) = \hat{T} e^{\frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{W}(t')}.$$

Ako se  $\hat{S}$ -matrica razvije u red i zadrži na prva dva člana, što odgovara linearnoj aproksimaciji po interakciji  $\hat{W}(t)$ :

$$\hat{S}^{\pm 1}(t, t_0) = 1 \pm \frac{\hat{T}}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{W}(t'),$$

tada je

$$\langle \hat{A}(x, t) \rangle_t = \langle \hat{\mathcal{A}}(x, t) \rangle_0 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \langle \hat{\mathcal{A}}(x, t) \hat{T} \hat{W}(t') - \hat{T} \hat{W}(t') \hat{\mathcal{A}}(x, t) \rangle_0 . \quad (5.4)$$

Kako hronološki operator  $\hat{T}$  deluje samo na  $\hat{W}(t')$ , ne mora se pisati u gornjem izrazu. Izraz ima smisla samo za  $t > t'$  pa ispred proizvoda operatora  $\hat{A}$  i  $\hat{W}$  uvodi se Hevisajdova step funkcija  $\Theta(t - t')$ , definisana na sledeći način:

$$\Theta(t - t') = \begin{cases} 1 & t > t' \\ 0 & t < t' \end{cases}$$

Zbog toga izraz (5.4) prelazi u:

$$\langle \hat{A}(x, t) \rangle_t = \langle \hat{\mathcal{A}}(x, t) \rangle_0 + L(t, t_0) , \quad (5.5)$$

gde je:

$$L(t, t_0) = \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \Theta(t - t') \langle \hat{\mathcal{A}}(x, t) \hat{W}(t') - \hat{W}(t') \hat{\mathcal{A}}(x, t) \rangle_0 \quad (5.6)$$

i naziva se linearни odziv ili reakcija sistema na spoljašnju perturbaciju  $W(t)$ .

Radi dalje analize linearног odziva potrebno je izvršiti konkretizaciju  $\hat{W}(t)$ . Jedna od opštijih formi hamiltonijana spoljašnje perturbacije je:

$$\hat{H}_{int}(t') = \int dx' \hat{B}(x', t') \varepsilon(x', t') , \quad (5.7)$$

pri čemu su  $\hat{B}(x', t')$  - operatori neke dinamičke varijable  $B$ , a  $\varepsilon(x', t')$  - funkcije koje nemaju operatorsku strukturu i ponekad se nazivaju C - brojevima. Kako je:

$$\hat{W}(t) = \exp \left( -\frac{H_0 t}{i\hbar} \right) \hat{H}_{int}(t) \exp \left( \frac{H_0 t}{i\hbar} \right) , \quad (5.8)$$

na osnovu (5.7) i (5.8) operator  $W(t')$  će biti:

$$\hat{W}(t') = \int dx' \hat{\mathcal{B}}(x', t') \varepsilon(x', t') , \quad (5.9)$$

gde je

$$\hat{\mathcal{B}}(x', t') = \exp \left( -\frac{H_0 t}{i\hbar} \right) \hat{B}(x', t') \exp \left( \frac{H_0 t}{i\hbar} \right)$$

Šredingerov operator napisan u reprezentaciji interakcije. Zamenom (5.9) u (5.6) dobija se:

$$L(t, t_0) = \frac{1}{i\hbar} \int dx' \int_{t_0}^t dt' \varepsilon(x', t') G(x, x'; t, t') , \quad (5.10)$$

gde je veličina:

$$G(x, x'; t, t') = \Theta(t - t') \langle \hat{\mathcal{A}}(x, t) \hat{\mathcal{B}}(x', t') - \hat{\mathcal{B}}(x', t') \hat{\mathcal{A}}(x, t) \rangle_0 \quad (5.11)$$

i naziva se **dvovremenska temperaturska retardovana funkcija Grina**. Ona zavisi od  $6N + 2$  promenljive (dva puta po tri prostorne i dve vremenske). Ako je prostor homogen (bez defekata, primesa itd.) onda Grinova funkcija, kao njegova fizička karakteristika, ne zavisi od konfiguracionih koordinata  $x$  i  $x'$  ponaosob, već od njihove razlike  $x - x'$ , pa se broj promenljivih svodi na  $3N + 2$ . Ako originalni operatori ne zavise eksplisitno od vremena, tj.  $\hat{A}(x, t) \equiv \hat{A}(x)$  i  $\hat{B}(x, t) \equiv \hat{B}(x)$  tada Grinova funkcija ne zavisi od vremenskih koordinata  $t$  i  $t'$  ponaosob, već od njihove razlike  $t - t'$  i ukupan broj promenljivih se svodi na  $3N + 1$ . U tom slučaju Grinova funkcija (5.11) prelazi u:

$$\begin{aligned} G(x, x'; t, t') &\longrightarrow G(x - x', t - t') = \\ &= \Theta(t - t') [\mathcal{J}_{AB}(x - x', t - t') - \mathcal{J}_{BA}(x - x', t - t')] . \end{aligned} \quad (5.12)$$

Ovde su uvedene korelacione funkcije:

$$\mathcal{J}_{AB}(x - x', t - t') = \langle \hat{A}(x, t) \hat{B}(x', t') \rangle_0 ; \quad \mathcal{J}_{BA}(x - x', t - t') = \langle \hat{B}(x', t') \hat{A}(x, t) \rangle_0 \quad (5.13)$$

koje u sebi sadrže svu neophodnu informaciju o svojstvima posmatranog sistema. Upravo iz ovog razloga metod Grinovih funkcija ima izuzetan značaj u teorijskoj fizici kondenzovane materije.

Ako se izvrši simbolička smena:  $x \rightarrow \vec{n}$  i  $x' \rightarrow \vec{m}$  i postavi uslov  $t' = 0$ , izraz za Grinovu funkciju može da se napiše u sledećem obliku:

$$G_{\vec{n}\vec{m}}(t) \equiv \langle \langle \hat{A}_{\vec{n}}(t) \mid \hat{B}_{\vec{m}}(0) \rangle \rangle = \Theta(t) \langle [\hat{A}_{\vec{n}}(t), \hat{B}_{\vec{m}}(0)] \rangle_0 . \quad (5.14)$$

Za najrasprostranjeniji način izračunavanja korelacionih funkcija, pa prema tome i svih relevantnih karakteristika sistema, smatra se metod jednačina kretanja za Grinove funkcije:

$$\frac{d}{dt} G_{\vec{n}\vec{m}}(t) = \frac{d}{dt} \Theta(t) \langle [\hat{A}_{\vec{n}}(t), \hat{B}_{\vec{m}}(0)] \rangle_0 + \Theta(t) \langle \left[ \frac{d\hat{A}_{\vec{n}}(t)}{dt}, \hat{B}_{\vec{m}}(0) \right] \rangle_0 . \quad (5.15)$$

Korišćenjem Hajzenbergovih jednačina kretanja  $i\hbar \frac{d}{dt} \hat{A}(t) = [\hat{A}(t), \hat{H}(t)]$  za operatore fizičkih veličina i osnovnih definicija  $\frac{d}{dt} \Theta(t) = \delta(t)$ ,  $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ , ovaj izraz se svodi na:

$$i\hbar \frac{d}{dt} G_{\vec{n}\vec{m}}(t) = i\hbar \delta(t) C_{\vec{n}\vec{m}} + \langle \langle [\hat{A}_{\vec{n}}(t), H(t)] \mid \hat{B}_{\vec{m}}(0) \rangle \rangle , \quad (5.16)$$

gde je  $C_{\vec{n}\vec{m}}$  korelaciona funkcija,  $C_{\vec{n}\vec{m}} = \langle [\hat{A}_{\vec{n}}(t), \hat{B}_{\vec{m}}(0)] \rangle$ .

Primenom Furieove transformacije:

$$G_{\vec{n}\vec{m}}(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega t} G_{\vec{n}\vec{m}}(\omega) \quad (5.17)$$

jednačina (5.16) prelazi u

$$\hbar\omega G_{\vec{n}\vec{m}}(\omega) = \frac{i\hbar}{2\pi} C_{\vec{n}\vec{m}} + \langle\langle [\hat{\mathcal{A}}_{\vec{n}}(t), H(t)] \mid \hat{\mathcal{B}}_{\vec{m}}(0)\rangle\rangle_{\omega}. \quad (5.18)$$

Vidi se da se Grinova funkcija  $G_{\vec{n}\vec{m}}(\omega) \equiv \langle\langle [\hat{\mathcal{A}}_{\vec{n}}(t) \mid \hat{\mathcal{B}}_{\vec{m}}(0)]\rangle\rangle_{\omega}$  izražava preko nove - više Grinove funkcije  $\langle\langle [\hat{\mathcal{A}}_{\vec{n}}(t), H(t)] \mid \hat{\mathcal{B}}_{\vec{m}}(0)\rangle\rangle_{\omega}$ . Više Grinove funkcije se računaju na isti način kao i obične (pomoću jednačina kretanja) te se tako dobija beskonačan niz, tzv. hijerarhija vezanih jednačina za određivanje Grinove funkcije. Da bi se i izračunala tražena jednočestična, a redje dvočestična Grinova funkcija mora se ovaj beskonačan red negde prekinuti korišćenjem neke dovoljno opravdane aproksimacije.

Interesantno je još podvući da Grinove funkcije imaju i dublji fizički smisao. Naime, realni delovi njihovih polova predstavljaju energije elementarnih pobudjenja dok recipročne vrednosti imaginarnih delova njihovih polova određuju vremena života tih eksitacija.

Pored toga, neophodno je dati vezu izmedju ovih Grinovih funkcija i korelacionih funkcija koje, kao što je napred već rečeno, definišu i sve ostale fizičke karakteristike posmatranog sistema. Ova veza se izražava preko spektralne teoreme:

$$\lim_{\delta \rightarrow +0} [G_{\vec{n}\vec{m}}(\omega + i\delta) - G_{\vec{n}\vec{m}}(\omega - i\delta)] = \left( e^{\hbar\omega/\theta} - 1 \right) \mathcal{J}_{\mathcal{BA}}^{\vec{n}\vec{m}}(\omega), \quad (5.19)$$

gde je  $\mathcal{J}_{\mathcal{BA}}^{\vec{n}\vec{m}}(\omega)$  Furieov transform korelace funkcije  $\mathcal{J}_{\mathcal{BA}}^{\vec{n}\vec{m}}(t)$ . Za  $t = 0$  korelace funkcije (5.13) predstavljaju srednje vrednosti proizvoda odgovarajućih operatora.

## 5.2. Polovi elektronskih Grinovih funkcija

Koreni determinante (3.19) predstavljaju polove Grinove funkcije i određuju energije elementarnih eksitacija (elektrona) sistema. U slučaju kada površinski parametri imaju vrednosti  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 \equiv \varepsilon = 0$  i  $w_1 = w_2 \equiv w = 0$  jednačina (3.18) ima analitičko rešenje oblika:

$$D_{N_z+1}(\varrho) = C_{N_z+1}(\zeta) = \frac{\sin(N_z + 2)\zeta}{\sin \zeta}; \quad \varrho = 2 \cos \zeta,$$

koji se svodi na uslov  $C_{N_z+1} \equiv 0$ , tako da se dobija<sup>7</sup>:

$$\zeta_{\mu} = \frac{\pi \mu}{N_z + 2}; \quad \mu = 1, 2, 3, \dots, N_z + 1.$$

Na osnovu ovoga i jednačine (3.16) nalazimo:

$$\hbar \omega_{\mu} = \Delta - 2W (\cos ak_x + \cos ak_y - \cos \zeta_{\mu}), \quad (5.20)$$

gde je  $\cos \zeta_{\mu} = -\cos ak_z(\nu)$ ,  $\nu = N_z + 2 - \mu$ , a

$$k_z(\nu) = \frac{\pi}{a} \frac{\nu}{N_z + 2}; \quad \nu = 1, 2, 3, \dots, N_z + 1. \quad (5.21)$$

---

<sup>7</sup>Videti Dodatak 5.3.

Zamenom ovih relacija u (3. 21) i uzimajući u obzir da je  $E_{\vec{k}}(\nu) = \hbar\omega_{\nu}$  i  $\Delta = 6W$ , sledi:

$$\begin{aligned}\mathcal{E}_{\vec{k}}(\nu) &\equiv \mathcal{F}_{k_x k_y} + \mathcal{G}_{k_z}(\nu), \\ \mathcal{F}_{k_x k_y} &= \sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y}{2}; \quad \mathcal{G}_{k_z}(\nu) = \sin^2 \frac{ak_z}{2},\end{aligned}\tag{5.22}$$

Izraz (5.22) predstavlja zakon disperzije slabo vezanih elektrona u idealnom filmu i ima istu formu kao izraz (2.44) dobijen za idealne neograničene (balk) strukture, s razlikom što je tamo  $k_z$  praktično kontinualno promenljivo (u intervalu<sup>8</sup>  $[0, \pi/a]$ ) kao što su  $k_x$  i  $k_y$ , a ovde je diskretno - dato izrazom (5.21).

Pored toga, uočava se da je:

$$k_x^{min} = k_y^{min} = 0; \quad k_z^{min} = \frac{\pi}{a} \frac{1}{N_z + 2} > 0,\tag{5.23}$$

pošto je u pitanju tanak film, odnosno:  $N_z \ll (N_x, N_y)$  i:

$$k_x^{max} = k_y^{max} = \frac{\pi}{a}; \quad k_z^{max} = \frac{\pi}{a} \frac{N_z + 1}{N_z + 2} < \frac{\pi}{a}.\tag{5.24}$$

Izmedju minimalne i maksimalne vrednosti za  $k_z$ , pa prema tome i za  $\mathcal{E}_{\vec{k}}$ , postoji još  $N_z - 1$ -a diskretna vrednost.

U skladu sa gore pomenutim, dolazimo do zaključka da elektronski spektar u tankom filmu poseduje dva energetska gepa, donji  $g$  i gornji  $h$ :

$$g \equiv \mathcal{E}_f^{min} - \mathcal{E}_b^{min} = \left( \frac{\pi}{N_z + 2} \right)^2; \quad h \equiv \mathcal{E}_b^{max} - \mathcal{E}_f^{max} = 2 \left( \frac{\pi}{N_z + 2} \right)^2\tag{5.25}$$

(indeks  $f$  označava film, a  $b$  beskonačnu strukturu).

Osnovna posledica postojanja energetskih gepova je „suženje“ zone dozvoljenih energija elektrona:

$$\Delta\mathcal{E} \equiv (\Delta\mathcal{E})_f = (\Delta\mathcal{E})_b - (g + h) = 1 - \left[ \frac{\pi}{2(N_z + 2)} \right]^2.\tag{5.26}$$

Odavde se vidi da se širina energetske zone elektrona kristalnog filma veoma brzo (parabolički) približava balkovskoj vrednosti, kada se debljina filma povećava, tj. kada raste broj slojeva  $N_z$ . Za izuzetno tanke filmove  $(\Delta\mathcal{E})_f$  je veoma uska, dok za  $N_z \rightarrow \infty$  ona teže  $(\Delta\mathcal{E})_b$ . Na isti način, u pravom termodinamičkom limesu ( $\varepsilon \rightarrow 0$ ,  $w \rightarrow 0$  i  $N_z \rightarrow \infty$ ), energije lokalizovanih stanja (videti tabele 3.1-3 i 3.4) teže balkovskim vrednostima.

---

<sup>8</sup>Ovo je desna polovina prve Briluenove zone, ali pošto je spektar elektrona simetričan, zaključak važi i za celu zonu.

### 5.3. Karakteristični polinomi Čebiševa

Karakteristične determinante oblika:

$$C_n(x) = \begin{vmatrix} x & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & x & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & x & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \ddots & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & x & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & x & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & x \end{vmatrix}_n \quad (5.27)$$

koje odgovaraju različitim vrednostima,  $n = 2, 3, 4, \dots, N$  uz prepostavljene početne uslove:

$$C_0(x) = 1 ; \quad C_1(x) = x ,$$

zadovoljavaju sledeću rekurentnu relaciju:

$$C_{n+1}(x) = xC_n(x) - C_{n-1}(x) \quad (5.28)$$

i nazivaju se Čebiševljevim polinomima<sup>9</sup>.

Uvodeći smenu:  $x = 2 \cos \varphi$  determinanta (5.21) može se analitički izraziti

$$C_n(x) \longrightarrow C_n(\varphi) = \frac{\sin[(n+1)\varphi]}{\sin(\varphi)} ; \quad \varphi \neq 0 . \quad (5.29)$$

Nule Čebiševljevih polinoma, koje slede iz uslova:

$$C_n(\varphi) \equiv 0 , \quad (5.30)$$

date su relacijom

$$\varphi_\nu = \frac{\pi}{n+1} \nu ; \quad \nu = 1, 2, 3, \dots, n . \quad (5.31)$$

---

<sup>9</sup>koja predstavlja homogenu diferencnu jednačinu drugog reda sa konstantnim koeficijentima

## 6. LITERATURA

1. B.S.Tošić: STATISTIČKA FIZIKA,  
*PMF IF*, Novi Sad 1978.
2. A.S.Davydov: TEORIYA TVERDOGO TELA,  
*Nauka*, Moskva 1976.
3. G.Rickayzen: GREEN'S FUNCTIONS AND CONDENSED MATTER,  
*Academic Press*, London 1980.
4. Ch.Kittel: UVOD U FIZIKU ČVRSTOG STANJA,  
*Sav.Admin.* Beograd 1970.
5. M.I.Kaganov: ELEKTRONY, FONONY, MAGNONY,  
*Nauka*, Moskva 1979.
6. I.Supek: TEORIJSKA FIZIKA I STRUKTURA MATERIJE,  
*Školska knjiga*, Zagreb 1977.
7. Lj.Ristovski: TEORIJA KONDENZOVANOG STANJA,  
*Fizički fakultet*, Beograd 1994.
8. D.Raković: FIZIČKE OSNOVE I KARAKTERISTIKE  
ELEKTROTEHNIČKIH MATERIJALA,  
*Elektrotehnički fakultet*, Beograd 1995.
9. D.Lj.Mirjanić, S.M.Stojković, J.P.Šetrajčić and S.K.Jaćimovski  
ELECTRON SPECTRA IN CRYSTAL FILMS  
*Proceedings 20th MIEL*, 177-179 (1995).
10. S.K.Jaćimovski, S.M.Stojković, A.Slavković,  
J.P.Šetrajčić, D.Lj.Mirjanić and S.Lazarev  
ELECTRON STATES IN CRYSTAL FILM-STRUCTURES  
*Zbornik Matice sprske* (pr.nauke) **90**, 95 (1996).
11. J.P.Šetrajčić, D.Lj.Mirjanić, Z.V.Bundalo, Z.Rajilić, S.Lazarev,  
M.Pantić, V.M.Zorić, N.V.Delić, A.S.Utješanović,  
S.M.Stojković, S.K.Jaćimovski, I.D.Vragović i A.Slavković  
SPEKTRI I STANJA FONONA I ELEKTRONA  
U JEDNOSLOJNIM KRISTALNIM STRUKTURAMA <sup>10</sup>  
*SFIN* - prihvaćeno (1996).
12. J.P.Šetrajčić, S.M.Stojković, S.Lazarev, D.Lj.Mirjanić and M.Budinčević  
GREEN'S FUNCTIONS METHOD APPLICATION ON CRYSTAL  
STRUCTURES WITH BROKEN TRANSLATIONAL SYMMETRY  
*Zbornik radova - 10. PriM*, 73-81 (1996).
13. J.P.Šetrajčić, S.M.Stojković, B.Abramović and S.Lazarev  
LOCALIZED ELECTRON STATES IN THIN LAYERED STRUCTURES  
*3<sup>rd</sup> BPU Conference*, Cluj-Napoca Romania - prihvaćeno (1997).

<sup>10</sup> Pregledni rad po pozivu