

УНИВЕРЗИТЕТ У НОВОМ САДУ
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ
Институт за физику

Природно-математички факултет
Радна заједница академичких послова
11000 НОВИ САД

Примљено: 25 okt 1996			
Орг. јед.	Бр.	Датум	Број посла
0603	9/278		

Биљана Кашерић

ПЕРТУРБАЦИОНИ ПРОРАЧУН
ФОНОНСКИХ ЕНЕРГИЈА
У ФИЛМ-СТРУКТУРАМА

Дипломски рад

ментор: др Јован Шетрајчић

Нови Сад, октобар 1996.

Da bi завршила овај рад, помогли су ми: ментор др Јован Шетрајчић, професор др Стева Појов, моји родитељи, мајка Драгојла и отац Зесимир, сестра Мирјана и зетј Торан, мој Миролуб, тетка Јула и теча Џвеле и другови Момо, Мирослав, ...

Једни су ми пружили многа стручне помоћи, други показали многа стрпљења, поједини давали неопходну подршку, а сви заједно многа несебичне љубави, па им се на томе, са женом да им погарено на исти начин узвратим, најтоплије и најсрданије захваљујем.

САДРЖАЈ:

1. УВОД	4
2. ТЕРМАЛНЕ ВИБРАЦИЈЕ КРИСТАЛНЕ РЕШЕТКЕ .	5
2.1. Неограничене кристалне структуре	5
2.2. Деформисани кристални филмови	15
3. ПЕРТУРБАЦИОНИ ПРОРАЧУН ФОНОНСКИХ ЕНЕРГИЈА У ФИЛМ-СТРУКТУРАМА	27
3.1. Пертурбација у недеформисаном филму	28
3.2. Пертурбација у деформисаном филму	35
4. ЗАКЉУЧАК	38
5. ЛИТЕРАТУРА	39

1. УВОД

Најчешћи предмет анализа у теоријској физици чврстог стања су идеални кристали, кристалне структуре које карактерише просторна хомогеност и транслациона инваријантност. Међутим, такве кристалне структуре у природи не постоје нити се у технолошким процесима добијају. Реалне кристалне структуре карактерише присуство нечистоћа као и граничне површине на којима се јављају различити физички феномени од значаја за практичну примену кристала. Реалне кристалне структуре су просторно нехомогене и са нарушеном транслационом симетријом. Ако бисмо реалне кристалне структуре анализирали методама теоријске физике које се користе у анализи идеалних структура многе појаве и ефекти карактеристични за реалне структуре остали би „невидљиви”.

Зашто нас у проблематици реалних кристала занимају баш фонони?

Фонони су главни носиоци механизма који проузрокују различите физичке појаве и ефекте у кристалу. Фонони одређују електричне, магнетне и суперпроводне особине кристала као и њихово термодинамичко понашање.

Шта су заправо фонони?

Појам фонона означава квант побуђења линеарног осцилатора у квантномеханичкој анализи. Када је реч о кристалима, фононима називамо кванте осциловања целог кристала а никако појединачних атома. То је због тога што сваки атом у кристалу приликом осциловања трпи утицај свих атома који га окружују, а и сам утиче на околне атоме. Зато се кристал, у смислу његових осцилаторских карактеристика, посматра као систем повезаних осцилатора, а фонон као колективни квант (механичких, термичких) побуђења у кристалу. Фонони су увек присутни у реалном кристалу, лако се термички побуђују и јављају се и на температурама блиским апсолутној нули.

У теоријској анализи фононског подсистема у кристалу, користе се пертурбациона анализа, Хајзенбергове једначине кретања, метод Гринових функција, . . . , а експериментално се могу проучавати применом расејања x -зрака и неутрона на кристалима.

У овом раду се користи пертурбациони метод за анализу фононских спектра.

У првом делу рада описане су термалне вибрације мале амплитуде у неограниченим кристалним структурама (идеални кристал) и фононски подсистем у деформисаном кристалном филму – реалнијој кристалној структури.

У другом делу користи се пертурбациона метода у анализи танког деформисаног филма са освртом на могућу практичну примену резултата.

2. ТЕРМАЛНЕ ВИБРАЦИЈЕ КРИСТАЛНЕ РЕШЕТКЕ

2.1. Неограничене кристалне структуре

Као резултат термичког побуђивања долази до осциловања атома (јона, молекула) у чворовима кристалне решетке. Ради се о вибрацијама мале амплитуде (у односу на растојање између чворова), а њихов карактер је одређен међуатомским силама у кристалу. Размотрићемо три врсте кристала: молекулске, ковалентне и јонске. Заједничко за молекулске и ковалентне кристале је да су изграђени од неутралних атома (молекула) који међусобно интерагују силама кратког домета чији интензитет брзо опада са растојањем. По томе се молекулски и ковалентни кристали битно разликују од атомских и њих ћемо разматрати на јединствен начин.

Молекулске кристале формирају елементи са попуњеним орбитама (инертни гасови) и они су диелектрици. Између молекула делују Ван дер Валсове (дипол-дипол) силе, па потенцијална енергија међумолекулске интеракције опада са растојањем по закону:

$$\varphi_{vdv} = \frac{C}{r^6},$$

где је C феноменолошка константа. Ван дер Валсова интеракција се јавља услед поларизације молекула (индуковања диполних момената). На мањим растојањима делују и одбојне силе па је укупна потенцијална енергија Ленард-Донсовог типа:

$$\varphi_{ij} = \varphi_0 \left[\left(\frac{A}{r} \right)^{12} - \left(\frac{C}{r} \right)^6 \right] \quad (2.1)$$

(A је, такође, феноменолошка константа).

Ковалентне кристале изграђују елементи чији су атоми међусобно везани ковалентном везом (C, Si, Ge). Енергија везе код ових кристала је око 10 eV што је за два реда величине веће него код молекулских кристала. Емпиријски је установљено да потенцијална енергија међумолекулске интеракције код ковалентне везе опада експоненцијално са растојањем, а њено одређивање представља сложени квантно-механички проблем.

Јонски кристали су изграђени од јона између којих делује Кулонова интеракција, сила дугог домета. Карактер ове интеракције, као и постојање електричног поља у јонском кристалу које неминовно утиче на вибрације јона, чини динамичку анализу кристала јонских остатака врло сложеном.

У даљем излагању изложићемо само теорију која се односи на ковалентне и молекулске кристале.

Кристал је сложени квантни систем састављен од јонског и електронског подсистема који могу да се опишу методама квантне механике. Међутим, код термичких вибрација мале амплитуде (у односу на растојање између чворова решетке), сагласно адијабатској апроксимацији, јонски подсистем можемо разматрати одвојено од електронског и обрнуто. У случају вибрација малих амплитуда, једначине кретања јона попримају облик једначина хармонијског кретања. То значи да се анализа кретања система јона своди на анализу система хармонијских осцилатора. Ако занемаримо унутрашње слободе кретања јонских остатака, надаље молекула, онда молекуле можемо посматрати као тачкасте осцилаторе распоређене по чворовима кристалне решетке и окарактерисане векторима положаја $\vec{r}_{n\alpha} = \vec{n} + \vec{r}_\alpha$, где је \vec{n} вектор транслације кристалне решетке који спаја изабрани координатни почетак са датом елементарном ћелијом, а \vec{r}_α вектор положаја уоченог α -тог молекула (или атома) у координатном систему везаном за елементарну ћелију ($\vec{n} + \vec{r}_\alpha$ одређује равнотежни положај молекула).

Узмимо да елементарна ћелија има k различитих атома са масама M_α , тако да је $\alpha = 1, 2, \dots, k$. Како молекули осцилују око равнотежних положаја на свим темперетурама различитим од апсолутне нуле, $\vec{r}_{n\alpha}$ се мења тако да је $\vec{r}_{n\alpha}(t) = \vec{r}_{n\alpha} + \vec{u}_{n\alpha}(t)$, где је $\vec{u}_{n\alpha}$ померање молекула у односу на равнотежни положај. Како је ово померање, сходно полазној претпоставци, мало, можемо извршити развој потенцијалне енергије посматраног система око положаја равнотеже на следећи начин (хармонијска апроксимација):

$$V = V_0 + \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}_\alpha, \vec{n}_\beta} \Phi_{\vec{n}_\alpha, \vec{n}_\beta}^{\vec{n}_\alpha, \vec{n}_\beta} u_{\vec{n}_\alpha} u_{\vec{n}_\beta}, \quad (2.2)$$

где су $i, j = (x, y, z)$ ознаке за пројекције померања на одговарајуће координатне осе. Коефицијенти развоја:

$$\Phi_{\vec{n}_\alpha, \vec{n}_\beta}^{\vec{n}_\alpha, \vec{n}_\beta} \equiv \left(\frac{\partial^2 V}{\partial u_{\vec{n}_\alpha, i} \partial u_{\vec{n}_\beta, j}} \right)_0 \quad (2.3)$$

задовољавају следеће особине:

$$\Phi_{\vec{n}\alpha_i}^{\vec{m}\beta_j} = \Phi_{\vec{m}\beta_j}^{\vec{n}\alpha_i}; \quad \Phi_{\vec{n}\alpha_i}^{\vec{m}\beta_j} = \Phi_{\alpha_i}^{\beta_j}(\vec{m} - \vec{n}); \quad \sum_{\vec{m}\beta} \Phi_{\vec{n}\alpha_i}^{\vec{m}\beta_j} = 0. \quad (2.4)$$

Прва релација директно следи из дефиниције коефицијента Φ . Друга релација садржи претпоставку да интеракција између молекула зависи само од њиховог међусобног растојања. Трећу релацију ћемо верификовати тако што ћемо извршити развој функције

$$F(u_{\vec{n}\alpha_i}) \equiv \frac{\partial V}{\partial u_{\vec{n}\alpha_i}}$$

у степени ред по померајима у око равнотежних положаја молекула:

$$\frac{\partial V}{\partial u_{\vec{n}\alpha_i}} = \left(\frac{\partial V}{\partial u_{\vec{n}\alpha_i}}\right)_0 + \sum_{\vec{m}\beta_j} \Phi_{\vec{n}\alpha_i}^{\vec{m}\beta_j} u_{\vec{m}\beta_j} + \dots$$

Први члан са десне стране знака једнакости једнак је нули, јер се развој врши око равнотежних положаја. Ако узмемо да се сви молекули помере за исти \vec{u}_0 у датом правцу, што одговара translацији кристала око целине, биће једнак нули и члан на левој страни. Тако ова једначина прелази у:

$$\sum_j (\vec{u}_0)_j \sum_{\vec{m}\beta} \Phi_{\vec{n}\alpha_i}^{\vec{m}\beta_j} = 0.$$

Хамилтонова функција кристала у хармонијској апроксимацији биће облика:

$$H = T + U = \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\alpha_i} M_{\alpha_i} \dot{u}_{\vec{n}\alpha_i}^2 + \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\alpha_i, \vec{m}\beta_j} \Phi_{\vec{n}\alpha_i}^{\vec{m}\beta_j} u_{\vec{n}\alpha_i} u_{\vec{m}\beta_j}, \quad (2.5)$$

па је једначина кретања за α -ти молекул пројектована на i -ту координатну осу облика:

$$M_{\alpha_i} \ddot{u}_{\vec{n}\alpha_i} = - \frac{\partial V}{\partial u_{\vec{n}\alpha_i}} = - \sum_{\vec{m}\beta_j} \Phi_{\vec{n}\alpha_i}^{\vec{m}\beta_j} u_{\vec{m}\beta_j}, \quad (2.6)$$

Ако уведемо пондерисане координате $S_{\vec{n}\alpha_i} = \sqrt{M_{\alpha_i}} u_{\vec{n}\alpha_i}$ једначина кретања постаје:

$$S_{\vec{n}\alpha_i} = - \sum_{\vec{m}\beta_j} D_{\vec{n}\alpha_i}^{\vec{m}\beta_j} S_{\vec{m}\beta_j}, \quad D_{\vec{n}\alpha_i}^{\vec{m}\beta_j} = \frac{1}{\sqrt{M_\alpha M_\beta}} \Phi_{\vec{n}\alpha_i}^{\vec{m}\beta_j}. \quad (2.7)$$

Решења ове једначине кретања тражимо у облику

$$S_{\vec{n}\alpha_i}(\vec{q}) = A_{\alpha_i}(\vec{q}) e^{i[\vec{q}(\vec{n}\vec{r}_\alpha) - \omega t]} = C_{\alpha_i}(\vec{q}) e^{i(\vec{q}\vec{n} - \omega t)} \quad (2.8)$$

$$C_{\alpha_i}(\vec{q}) = A_{\alpha_i}(\vec{q}) e^{i\vec{q}\vec{r}_\alpha}$$

из два разлога. Први, јер горња једначина кретања (2.7) представља једначину хармонијског кретања коме одговара хармонијски облик зависности од времена $e^{i\omega t}$. Други, због тога што је кристал просторно периодична структура па такво мора бити и решење $S_{\vec{n}\alpha_i}^*$. Заменом решења (2.8) у једначину кретања (2.7) добијамо:

$$\omega^2(\vec{q}) C_{\alpha_i} = \sum_{\beta_j} D_{\alpha_i}^{\beta_j} C_{\beta_j}, \quad (2.9)$$

где је:

$$D_{\alpha_i}^{\beta_j} = \sum_{\vec{m}} D_{\vec{n}\alpha_i}^{\vec{m}\beta_j} e^{i\vec{q}(\vec{m} - \vec{n})} = \frac{1}{\sqrt{M_\alpha M_\beta}} \sum_{\vec{m}} \Phi_{\vec{n}\alpha_i}^{\vec{m}\beta_j} e^{i\vec{q}(\vec{m} - \vec{n})}.$$

$D_{\alpha_i}^{\beta_j}$ се назива динамичка матрица и она не зависи од вектора решетке \vec{n} . Она има следеће важне особине:

$$D_{\alpha_i}^{\beta_j} = [D_{\alpha_i}^{\beta_j}]^* ; \quad D_{\alpha_i}^{\beta_j}(-\vec{q}) = [D_{\alpha_i}^{\beta_j}(\vec{q})]^*$$

Прва особина показује да је D ермитска матрица и може се доказати полазећи од дефиниције динамичке матрице и користећи особине величине Φ . Друга особина директно следи из дефиниционе релације. Користећи ове особине из (2.9) добијамо да је

* Примена линеарног оператора translације $T_{\vec{m}}$ на предложено решење (2.7) даје: $T_{\vec{m}} S_{\vec{n}\alpha_i}(\vec{q}) = e^{i\vec{q}\vec{m}} S_{\vec{n}\alpha_i}$ а то значи да је S својствена функција овог оператора.

$$\omega^2(-\vec{q}) C_{\alpha_i}(-\vec{q}) = \sum_{\beta_j} D_{\alpha_i}^{\beta_j}(\vec{q}) C_{\beta_j}(-\vec{q}) \quad (2.10)$$

Поређењем са (2.9), независно од тога да ли се при замени \vec{q} са $-\vec{q}$ мења знак величине C , налазимо да је $\omega(\vec{q}) = \omega(-\vec{q})$. Ово представља исказ познате Крамерсове теореме. Из једначине (2.9) следи да су C_{α_i} својствени вектори, а ω^2 својствене вредности динамичке матрице D .

Једначина (2.9) је систем од $3k$ једначина по непознатим величинама C_{α_i} , тако да имамо и $3k$ вредности за ω за сваку дату вредност таласног вектора \vec{q} . Како \vec{q} има N допуштених вредности, где је N број елементарних ћелија кристала, то ω , у општем случају, може имати $3kN$ вредности. Циљ овог разматрања је да одредимо допуштене вредности учестаности осциловања ω за дато \vec{q} . Њих можемо наћи и из услова решивости система једначина (2.9), али већ знамо да у општем случају за свако \vec{q} има $3k$ различитих начина осциловања. У даљој анализи зависности фреквенције осциловања од таласног вектора имаћемо у виду следеће особине својствене векторима динамичке матрице који иначе одређују амплитуде осциловања:

$$[C_{\alpha_i}(\vec{q})]^* = C_{\alpha_i}(-\vec{q}),$$

а како је динамичка матрица ермитска, онда се њени својствени вектори могу ортогонализовати. У том случају испуњаваће и следеће услове:

$$\sum_i C_{\alpha_i} C_{\beta_i}^* = \delta_{\alpha\beta}; \quad \sum_{\alpha} C_{\alpha_i} C_{\alpha_j}^* = \delta_{ij}.$$

Међу $3k$ могућих учестаности функције осциловања издвојићемо прво акустичке моде осциловања. Код њих је зависност фреквенције од таласног вектора (\vec{q}) таква да је у дуготаласној апроксимацији ($q \rightarrow 0$) ω сразмерно $q \equiv |\vec{q}|$:

$$D_{\alpha_i}^{\beta_j} = \sum_{\vec{n}} D_{\vec{n}\alpha_i}^{\vec{n}\beta_j} = \frac{1}{\sqrt{M_{\alpha} M_{\beta}}} \sum_{\vec{n}} \Phi_{\vec{n}\alpha_i}^{\vec{n}\beta_j}. \quad (2.11)$$

С обзиром да су, у овом случају, компоненте динамичке матрице реалне, а то значи и да су реални својствени вектори C_{α_i} , из једначине (2.9) налазимо да је

$$\omega^2(0) C_{\alpha_i} = \sum_{\beta_j} \sum_{\vec{m}} \frac{1}{\sqrt{M_\alpha M_\beta}} \sum_{\vec{n}} \Phi_{\vec{n}\alpha_i}^{\vec{m}\beta_j} C_{\beta_j}.$$

Сумирањем леве и десне стране једначине по α добијамо

$$\omega^2(0) \sum_{\alpha} C_{\alpha_i} \sqrt{M_\alpha} = \sum_{\beta_j} \frac{C_{\beta_j}}{\sqrt{M_\beta}} \sum_{\vec{m}\alpha} \Phi_{\vec{n}\alpha_i}^{\vec{m}\beta_j}.$$

Узевши у обзир трећу особину величине Φ , израз на десној страни једнак је нули, тако да је:

$$\omega^2(0) \sum_{\alpha} C_{\alpha_i} \sqrt{M_\alpha} = 0.$$

У случају $\sum_{\alpha} C_{\alpha_i} \sqrt{M_\alpha} \neq 0$ имамо:

$$\begin{aligned} \omega_1^2(0) \sum_{\alpha} C_{\alpha x} \sqrt{M_\alpha} &= 0 \Rightarrow \omega_1(0) = 0 \\ \omega_2^2(0) \sum_{\alpha} C_{\alpha y} \sqrt{M_\alpha} &= 0 \Rightarrow \omega_2(0) = 0 \\ \omega_3^2(0) \sum_{\alpha} C_{\alpha z} \sqrt{M_\alpha} &= 0 \Rightarrow \omega_3(0) = 0 \end{aligned} \quad (2.12)$$

Значи, постоје само три учестаности (фреквенције) за које је испуњен услов $\sum_{\alpha} C_{\alpha_i} \sqrt{M_\alpha} \neq 0$ и оне су акустичке, јер су једнаке нули за $q=0$. Остале $3k-3$ фреквенције су различите од нуле за $q=0$ и одговарају случају $\sum_{\alpha} C_{\alpha_i} \sqrt{M_\alpha} = 0$.

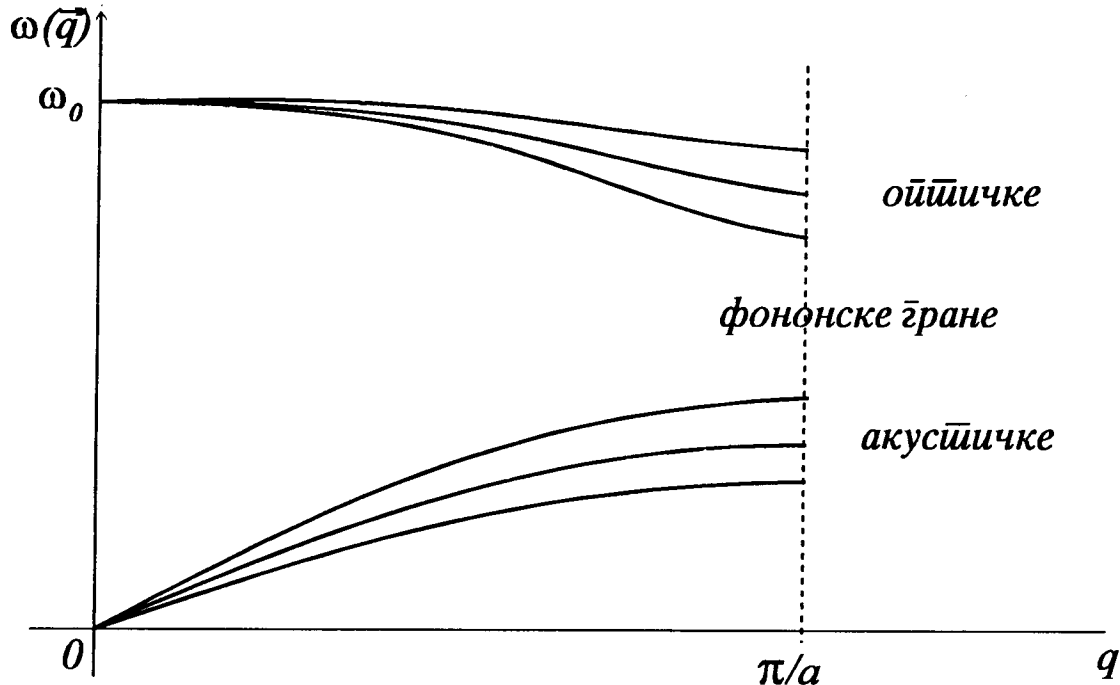
Пошто је

$$\sum_{\alpha} C_{\alpha_i} \sqrt{M_\alpha} = \sum_{\alpha} S_{\vec{n}\alpha_i}(q=0) \sqrt{M_\alpha} = \sum_{\alpha} M_\alpha u_{\vec{n}\alpha_i}(q=0) = 0 \quad (2.13)$$

видимо да молекули у елементарној ћелији осцилују тако да центар елементарне ћелије кристала остаје непокретан. То су *оптичке моде осциловања* молекула.

Акустичке моде, којих увек има три, се могу побудити произвљно малом енергијом, док је за побуду било које оптичке моде потребно уложити неку минималну

енергију $\hbar \omega_0$, где је ω_0 вредност фреквенције ω за $q = 0$: $\omega_0 \equiv \omega(0)$. Код оптичких мода суседни молекули осцилују у против-фази (само тада центар масе елементарне ћелије остаје непокретан), а код акустичких мода они осцилују у син-фази. Код кристала са простом елементарном ћелијом могу се јавити само три акустичке моде осциловања.



Слика 2.1

Својствени проблем динамичке матрице D , односно систем једначина (2.9) можемо написати и у другачијем облику:

$$\omega_p^2(\vec{q}) e^{\alpha_p} = \sum_{\beta} D_{\alpha_i}^{\beta_j} e^{\beta_p}. \quad (2.14)$$

Из једначина (2.8) и (2.14) следи да су решења једначине кретања (2.6) облика:

$$u_{\vec{n}\alpha_p}(\vec{q}) = \frac{e_{\alpha_p}(\vec{q})}{\sqrt{M_{\alpha}}} e^{i(\vec{q}\vec{n} - \omega_p t)}, \quad (2.15)$$

односно

$$u_{\vec{n}\alpha_p}(\vec{q}) = \frac{e_{\alpha_p}(\vec{q})}{\sqrt{M_{\alpha}}} e^{i(\vec{q}\vec{n} - \omega_p t)}. \quad (2.16)$$

Из горњих једначина следи да својствени вектори динамичке матрице представљају векторе поларизације који одређују правац и смер осциловања молекула. Заменом решења (2.8) у Хамилтонову функцију (2.5) добијамо:

$$H = \frac{1}{2} \left(\sum_{\vec{n}\alpha_i} \dot{S}_{\vec{n}\alpha_i}^2 + \sum_{\vec{n}\alpha_i, \vec{m}\beta_j} D_{\alpha_i}^{\beta_j} S_{\vec{n}\alpha_i} S_{\vec{m}\beta_j} \right). \quad (2.17)$$

Овде се види да се дијагонализација Хамилтонове функције своди на дијагонализацију динамичке матрице. Изразимо ли Хамилтонову функцију преко реалних генералисаних координата $Q_p(\vec{q}, t)$ и импулса $P_p(\vec{q}, t)$ имаћемо њен следећи дијагонални облик:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\vec{q}} [P_p^2(\vec{q}, t) + \omega_p^2(\vec{q}) Q_p^2(\vec{q}, t)]. \quad (2.18)$$

Координате $Q_p(\vec{q}, t)$ су колективне координате, што значи да су термалне вибрације кристалне решетке колективни, односно таласни феномен. Другим речима, генералисане координате се не односе на поједине, већ на укупне (све) молекуле кристала.

Заменом генералисаних $P_p(\vec{q}, t)$ у Хамилтонову функцију, односно заменом

$$\dot{Q}_p(\vec{q}) = P_p(\vec{q}) \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial Q_p(\vec{q})} \quad (2.19)$$

долазимо до следећег квантномеханичког облика хамилтонијана:

$$H = \sum_{\vec{q}} \left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial Q_p^2(\vec{q})} + \frac{1}{2} \omega_p^2(\vec{q}) Q_p^2(\vec{q}) \right]. \quad (2.20)$$

Овај израз представља хамилтонијан $3kN$ независних квантних линеарних осцилатора јединичне масе. У том случају таласна функција оваквог система једнака је производу таласних функција свих осцилатора, а енергија збиру њихових енергија. Решавање својственог проблема хамилтонијана система, своди се на решавање проблема линеарног хармонијског осцилатора. У даљем излагању изоставићемо навођење индекса p и таласног вектора \vec{q} , значи, разматрамо својствени проблем хамилтонијана:

$$H_1 = \frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial Q^2} + \frac{1}{2} \omega^2 Q^2. \quad (2.21)$$

Увођењем смене: $\xi = \sqrt{\frac{\omega}{\hbar}} \cdot Q$ добијамо:

$$H_1 = \frac{\hbar\omega}{2} \left(-\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \xi^2 \right),$$

а решавање његовог својственог проблема се своди на решавање Шредингерове једначине

$$\frac{\hbar\omega}{2} \left(-\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \xi^2 \right) \psi = E \psi. \quad (2.22)$$

Својствене вредности и својствене функције су тада облика:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega; \quad \psi_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi), \quad (2.23)$$

$H_n(\xi)$ су Ермитови полиноми и они задовољавају следеће релације:

$$\xi H_n = n H_{n-1} + \frac{1}{2} H_{n+1}; \quad \frac{dH_n}{d\xi} = 2n H_{n-1}.$$

На основу ових својстава добијамо и следеће рекурентне релације које задовољавају таласне функције ψ_n :

$$\frac{d\psi_n}{d\xi} = \sqrt{\frac{n}{2}} \psi_{n-1} - \sqrt{\frac{n+1}{2}} \psi_{n+1}; \quad \xi \psi_n = \sqrt{\frac{n}{2}} \psi_{n-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \psi_{n+1}. \quad (2.24)$$

Сабирањем ових двеју једначина, односно, одузимањем прве од друге, добијамо:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi + \frac{d}{d\xi} \right) \psi_n = \sqrt{n} \psi_{n-1}; \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right) \psi_n = \sqrt{n+1} \psi_{n+1}. \quad (2.25)$$

На основу (2.24) и (2.25) дефинишемо нове операторе b и b^+ :

$$b = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi + \frac{d}{d\xi} \right); \quad b^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right) \quad (2.26)$$

који на таласне функције ψ_n делују на следећи начин:

$$b\psi_n = \sqrt{n}\psi_{n-1}; \quad b^+\psi_n = \sqrt{n+1}\psi_{n+1}.$$

Видимо да оператор b делујући на функцију ψ_n даје функцију стања ψ_{n-1} , односно „преводи” систем из енергетског стања E_n у $E_{n-1} = E_n - \hbar\omega$ (анихилишу колективно побуђење - фонон енергије), а оператор b^+ „пребацује” систем из стања E_n у $E_{n+1} = E_n + \hbar\omega$ (креирају фонон). Узастопна примена оператора b и b^+ на ψ_n даје:

$$b^+b\psi_n = n\psi_n,$$

а пошто је:

$$\hbar\omega \cdot \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right) \cdot \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{d}{d\xi}\right)\psi_n = \frac{\hbar\omega}{2}\left(-\frac{d^2}{d\xi^2} + \xi^2\right)\psi_n - \frac{\hbar\omega}{2}\left(\frac{d}{d\xi} \cdot \xi - \xi \frac{d}{d\xi}\right)\psi_n,$$

применом тих оператора добијамо:

$$\hbar\omega\left(b^+b + \frac{1}{2}\right)\psi_n = E_n\psi_n$$

где је $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$.

Сада хамилтонијан посматраног линеарног хармонијског система можемо изразити преко оператора b и b^+

$$H_1 = \hbar\omega\left(b^+b + \frac{1}{2}\right). \quad (2.27)$$

Ако хамилтонијан (2.20) изразимо преко оператора креације и анихилације фонона добијамо:

$$H = \sum_{\vec{q}} \hbar\omega_p(\vec{q})\left[b_p^+(\vec{q})b_p(\vec{q}) + \frac{1}{2}\right], \quad (2.28)$$

узимајући у обзир и релације:

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\xi} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(b - b^+) & P_p(q) &= \frac{\hbar}{2} \sqrt{\frac{\omega_p(q)}{2\hbar}} [b_p(q) - b_p^+(q)] \\ & & \Rightarrow & \\ \xi &= \frac{1}{\sqrt{2}}(b + b^+) & Q_p(q) &= \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_p}} [b_p(q) + b_p^+(q)] \end{aligned} \quad (2.29)$$

коначно добијамо израз за померај молекула у репрезентацији друге квантизације:

$$\vec{u}_{n\alpha} = \sum_{p\vec{q}} \sqrt{\frac{\hbar}{2NM_\alpha\omega_p}} \vec{e}_p(\vec{q}) [b_p(\vec{q}) + b_p^+(-\vec{q})] e^{i\vec{q}\vec{r}}. \quad (2.30)$$

На основу претходних разматрања следи да кристал, када су у питању термалне вибрације мале амплитуде, можемо посматрати као суд дате запремине у коме се налази гас неинтерагујућих квазичестица - фонона. При том морамо имати у виду да се фонони могу третирати као квазичестице само у инверзном простору. Број фонона расте са увећањем температуре, јер унутрашња енергија фононског гаса, као и идеалног гаса, зависи (и то прилично линеарно) само од температуре. Постоји онолико типова фонона, колико и различитих начина осциловања, значи $3k$, где је k - број атома у елементарној ћелији кристала. Од тога три су тзв. акустички а преостали $3k-3$ су оптички фонони. Међусобно се разликују у понашању учестаности $\omega_n(\vec{q})$ у лимесу кад $|\vec{q}| \rightarrow 0$. Код акустичних је тај лимес једнак нули, а код оптичких је различит од нуле (слика 2.1).

2.2. Деформисани кристални филмови

У овом поглављу биће формиран теоријски модел који се базира на деформацији кристалне структуре, односно у нарушењу симетрије распореда атома унутар филма (кристалне структуре ограничене двома неограниченим паралелним површинама). Деформација се постиже спатеровањем (допинговањем) основне матрице страним атомима или деловањем спољашњег притиска на граничне површине.

Како се дошло на идеју да се испитују баш овакви кристални системи?

Резултати научних радова показали су да је критична температура код суперпроводних керамика знатно виша него код дотад познатих структура. Суперпроводне керамике имају ситнозрнасту структуру и праве се спатеровањем и пресовањем. Њихово откриће је дало идеју да адекватном дистрибуцијом маса дуж једног правца у танким филмовима могу бити фононски спектри тако промењени да се постиже

виша активациона температура него код неограничених и недеформисаних одговарајућих структура.

Анализа ће бити вршена на кристалу просте тетраедарске структуре, дебљине L у Z -правцу. Овај кристал представља основну матрицу. За константе решетке се узима да су:

$$a_x = a_y = a; \quad a_z = 3a$$

Константа a_z је већа од a_x и a_y , па се због тога страни (спатеровани) атоми распоређују дуж тог правца где је највеће међуатомско растојање, тј. највећа енергетска погодност. На тај начин се може добити тражена дистрибуција маса дуж само једног правца.

У оквиру овог модела биће обрађен симетричан случај спатеровања. Филм се дакле, допингује истовремено са обе граничне површине дуж Z -правца. Убачени атоми образују „гроздове”, тј. гомилају се око граничних површина, а према средини филма њихов број опада. Иначе, претпоставља се да су убачени атоми лакши од „домаћих” атома. За атоме који припадају граничним површинама претпоставља се да у Z -правцу нису „замрзнути”, и да ове површине не представљају „зид”, тј. да су константе истезања $C_{\alpha\alpha, N_z+1}$ и $C_{\alpha\alpha, -1}$ различите од нуле.

Полазни хамилтонијан фононског система у апроксимацији најближих суседа има стандардан облик:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\vec{n}} \frac{(p_{\vec{n}}^{\alpha})^2}{M_{\vec{n}}} + \frac{1}{4} \sum_{\alpha, \vec{n}, \vec{\lambda}} C_n^{\alpha\alpha} (u_{\vec{n}}^{\alpha} - u_{\vec{n}-\vec{\lambda}}^{\alpha})^2. \quad (2.31)$$

Као што је наглашено, приликом спатеровања убачени атоми се размештају дуж Z -осе, па се зато у том правцу маса основне матрице мора заменити редукованом масом. Редукована маса ће зависити од индекса решетке у Z -правцу, али не и у X и Y -правцу (јер тамо нема нагомилавања):

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

Исто важи и за константе истезања које, због присуства убачених атома, такође зависе (само) од n_z :

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

Ако се посматра n -ти атом и његова два најближа суседа биће:

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

Хамилтонијан модела тада добија облик:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \vec{\kappa}} \frac{(p_{\vec{\kappa}}^{\alpha})^2}{M_{n_z}} + \frac{1}{4} \sum_{\alpha, \vec{\kappa}} C_{\alpha\alpha n_z} [(u_{\vec{\kappa}}^{\alpha} - u_{\vec{\kappa}+\vec{\lambda}}^{\alpha})^2 + (u_{\vec{\kappa}}^{\alpha} - u_{\vec{\kappa}-\vec{\lambda}}^{\alpha})^2]. \quad (2.32)$$

Он се може написати као збир „површинског” H_p и „запреминског” H_v хамилтонијана (површински хамилтонијан описује кретање атома око граничних површина ($n_z = 0, N_z$), а запремински - унутрашњих слојева филма; због одсуства слојева $n_z = -1$ и $n_z = N_z + 1$, одговарајући фононски помераји су једнаки нули):

$$H = H_p + H_v \quad (2.33)$$

где H_p и H_v имају следеће облике:

$$H_p = \frac{1}{4} \sum_{\alpha, n_x, n_y} \{ C_{\alpha\alpha, 0} [(u_{\alpha, n_x, n_y, 0} - u_{\alpha, n_x-1, n_y, 0})^2 + (u_{\alpha, n_x, n_y, 0} - u_{\alpha, n_x+1, n_y, 0})^2 + (u_{\alpha, n_x, n_y, 0} - u_{\alpha, n_x, n_y-1, 0})^2 + (u_{\alpha, n_x, n_y, 0} - u_{\alpha, n_x, n_y+1, 0})^2 + (u_{\alpha, n_x, n_y, 0} - u_{\alpha, n_x, n_y, 1})^2 + (u_{\alpha, n_x, n_y, 0} - u_{\alpha, n_x, n_y, N_z})^2] + C_{\alpha\alpha, N_z} [(u_{\alpha, n_x, n_y, N_z} - u_{\alpha, n_x-1, n_y, N_z})^2 + (u_{\alpha, n_x, n_y, N_z} - u_{\alpha, n_x+1, n_y, N_z})^2 + (u_{\alpha, n_x, n_y, N_z} - u_{\alpha, n_x, n_y-1, N_z})^2 + (u_{\alpha, n_x, n_y, N_z} - u_{\alpha, n_x, n_y+1, N_z})^2 + (u_{\alpha, n_x, n_y, N_z} - u_{\alpha, n_x, n_y, N_z-1})^2 + (u_{\alpha, n_x, n_y, N_z} - u_{\alpha, n_x, n_y, N_z+1})^2] \}, \quad (2.34)$$

$$H_v = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, n_x, n_y, n_z} \frac{(p_{\alpha, n_x, n_y, n_z})^2}{M_{n_z}} + \frac{1}{4} \sum_{n_z=1}^{N_z-1} C_{\alpha\alpha n_z} [(u_{\alpha, n_x, n_y, n_z} - u_{\alpha, n_x-1, n_y, n_z})^2 + (u_{\alpha, n_x, n_y, n_z} - u_{\alpha, n_x+1, n_y, n_z})^2 + (u_{\alpha, n_x, n_y, n_z} - u_{\alpha, n_x, n_y-1, n_z})^2 + (u_{\alpha, n_x, n_y, n_z} - u_{\alpha, n_x, n_y+1, n_z})^2 + (u_{\alpha, n_x, n_y, n_z} - u_{\alpha, n_x, n_y, n_z-1})^2 + (u_{\alpha, n_x, n_y, n_z} - u_{\alpha, n_x, n_y, n_z+1})^2]. \quad (2.35)$$

Потребно је наћи једначине кретања за фононске помераје. При томе се користе уобичајене Хајзенбергове једначине за u и p :

$$i\hbar \dot{u}_{\beta, m_x, m_y, m_z} = [u_{\beta, m_x, m_y, m_z}, H] \quad (2.36)$$

$$i\hbar \dot{p}_{\beta, m_x, m_y, m_z} = [p_{\beta, m_x, m_y, m_z}, H] \quad (2.37)$$

Помоћу стандардних комутационих релација:

$$[u_{\vec{n}}^{\alpha}, p_{\vec{n}}^{\beta}] = i\hbar \delta_{\vec{n}\vec{n}} \delta_{\alpha\beta}; \quad [u_{\vec{n}}^{\alpha}, u_{\vec{n}}^{\beta}] = [p_{\vec{n}}^{\alpha}, p_{\vec{n}}^{\beta}] = 0,$$

рачунају се одговарајући комутатори и добијају се:

$$[u_{\beta, m_x, m_y, m_z}, H] = \frac{i\hbar}{M_{m_z}} p_{\beta, m_x, m_y, m_z} \quad (2.38a)$$

$$\begin{aligned} [p_{\beta, m_x, m_y, m_z}, H] = & i\hbar [C_{\beta\beta, m_z} (u_{\beta, m_{x-1}, m_y, m_z} + u_{\beta, m_{x+1}, m_y, m_z} + u_{\beta, m_x, m_{y-1}, m_z} + \\ & + u_{\beta, m_x, m_{y+1}, m_z} - 4u_{\beta, m_x, m_y, m_z}) + \frac{C_{\beta\beta, m_{z+1}}}{2} (u_{\beta, m_x, m_y, m_{z-1}} + u_{\beta, m_x, m_y, m_{z+1}} - 2u_{\beta, m_x, m_y, m_z}) + \\ & + \frac{C_{\beta\beta, m_{z+1}}}{2} (u_{\beta, m_x, m_y, m_{z+1}} + u_{\beta, m_x, m_y, m_z}) + \frac{C_{\beta\beta, m_{z-1}}}{2} (u_{\beta, m_x, m_y, m_{z-1}} + u_{\beta, m_x, m_y, m_z})]. \end{aligned} \quad (2.38b)$$

На основу тога следи:

$$i\hbar \dot{u}_{\beta, m_x, m_y, m_z} = \frac{i\hbar}{M_{m_z}} p_{\beta, m_x, m_y, m_z}, \quad (2.39)$$

а диференцирањем ове релације по времену:

$$i\hbar \ddot{u}_{\beta, m_x, m_y, m_z} = \frac{i\hbar}{M_{m_z}} \dot{p}_{\beta, m_x, m_y, m_z} = \frac{1}{M_{m_z}} [p_{\beta, m_x, m_y, m_z}, H]. \quad (2.40)$$

Комбинацијом израза (2.38b) и (2.40) добија се диференцијално-диференцна једначина облика:

$$\begin{aligned}
 \ddot{u}_{\beta, m_x, m_y, m_z} = & \frac{C_{\beta\beta, m_z}}{M_{m_z}} (u_{\beta, m_{x+1}, m_y, m_z} + u_{\beta, m_{x-1}, m_y, m_z} - 2u_{\beta, m_x, m_y, m_z} + \\
 & + u_{\beta, m_x, m_{y+1}, m_z} + u_{\beta, m_x, m_{y-1}, m_z} - 2u_{\beta, m_x, m_y, m_z}) + \\
 & + \frac{C_{\beta\beta, m_z}}{2M_{m_z}} (u_{\beta, m_x, m_y, m_{z+1}} + u_{\beta, m_x, m_y, m_{z-1}} - 2u_{\beta, m_x, m_y, m_z}) + \\
 & + \frac{C_{\beta\beta, m_{z+1}}}{2M_{m_z}} (u_{\beta, m_x, m_y, m_{z+1}} - u_{\beta, m_x, m_y, m_z}) + \\
 & + \frac{C_{\beta\beta, m_{z-1}}}{2M_{m_z}} (u_{\beta, m_x, m_y, m_{z-1}} - u_{\beta, m_x, m_y, m_z}) + .
 \end{aligned} \tag{2.41}$$

Решења једначине (2.41) могу да се потраже се у облику производа непознате функције у Z-правцу и равних хармонијских таласа у XY-равнима:

$$u_{\beta, m_x, m_y, m_z} = \Phi_{\beta, m_z} e^{ia(k_x m_x + k_y m_y) - i\omega t} \tag{2.42}$$

Налажењем одговарајућих извода и њиховим убацивањем у једначину (2.41) добија се диференца једначина за амплитуде Φ_{α, n_z} за $n_z = 1, 2, \dots, N_z - 1$ (при том се врше прелази $C_{\beta\beta} \rightarrow C_{\alpha}$; $m_x, m_y, m_z \rightarrow n_x, n_y, n_z$):

$$\begin{aligned}
 \Phi_{\alpha, n_z} \left\{ \frac{4C_{\alpha, \alpha, n_z}}{M_{m_z}} \left[\sin^2\left(\frac{ak_x}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{ak_y}{2}\right) \right] - \omega^2 \right\} = & \frac{C_{\alpha, \alpha, n_z}}{2M_{n_z}} (\Phi_{\alpha, n_{z+1}} + \Phi_{\alpha, n_{z-1}} - \\
 & + 2\Phi_{\alpha, n_z}) + \frac{C_{\alpha, \alpha, n_{z+1}}}{2M_{n_z}} (\Phi_{\alpha, n_{z+1}} - \Phi_{\alpha, n_z}) + \frac{C_{\alpha, \alpha, n_{z-1}}}{2M_{n_z}} (\Phi_{\alpha, n_{z-1}} - \Phi_{\alpha, n_z}) .
 \end{aligned} \tag{2.43}$$

За $n_z=0$ и $n_z=N_z$ добијају се граничне једначине, при чему се узима да су функције $\Phi_{\alpha, -1}$ и Φ_{α, N_z+1} једнаке нули, а Хукове константе истезања $C_{\alpha, \alpha, -1}$ и $C_{\alpha, \alpha, N_z+1}$ различите од нуле:

$$\begin{aligned}
 2\Phi_{\alpha, 0} \left\{ \omega^2 M_0 - 4C_{\alpha, \alpha, 0} \left[\sin^2\left(\frac{ak_x}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{ak_y}{2}\right) \right] \right\} + C_{\alpha, \alpha, 0} (\Phi_{\alpha, 1} - 2\Phi_{\alpha, 0}) + \\
 + C_{\alpha, \alpha, 1} (\Phi_{\alpha, 1} - \Phi_{\alpha, 0}) - C_{\alpha, \alpha, -1} \Phi_{\alpha, 0} = 0 ,
 \end{aligned} \tag{2.44a}$$

$$2\Phi_{\alpha, N_z} \left\{ \omega^2 M_{N_z} - 4C_{\alpha, \alpha, N_z} \left[\sin^2 \left(\frac{ak_x}{2} \right) + \sin^2 \left(\frac{ak_y}{2} \right) \right] \right\} + C_{\alpha, \alpha, N_z} (\Phi_{\alpha, N_{z-1}} - 2\Phi_{\alpha, N_z}) + C_{\alpha, \alpha, N_{z-1}} (\Phi_{\alpha, N_{z-1}} - \Phi_{\alpha, N_z}) - C_{\alpha, \alpha, N_{z+1}} \Phi_{\alpha, N_z} = 0. \quad (2.44b)$$

Једначине (2.43) и (2.44 а и б) представљају систем од $(N_z + 1)$ диференцијалних једначина. Поступак одређивања дозвољених фононских стања на основу овог система хомогених једначина је веома сложен. Да би се проблем ублажио врши се прелаз на континуалне варијабле и развој одговарајућих величина у Тајлоров ред. Тада:

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

У истом циљу се спроводи и апроксимација малих таласних вектора ($k \rightarrow 0$), па је:

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

У Тајлоров ред развијају се величине:

$$\begin{aligned} \Phi_{\alpha, n_{\pm 1}} &= \Phi_{\alpha}(z \pm a_z) = \Phi_{\alpha}(z) \pm a_z \frac{d\Phi_{\alpha}(z)}{dz} + \frac{a_z^2}{2} \frac{d^2\Phi_{\alpha}(z)}{dz^2} \pm \dots \\ C_{\alpha, n_{\pm 1}} &= C_{\alpha}(z \pm a_z) = C_{\alpha}(z) \pm a_z \frac{dC_{\alpha}(z)}{dz} + \dots \end{aligned}$$

Након преласка на континуум, заменом дискретних величина континуалним и убацивањем развијених у ред величина, диференцијална једначина (2.43) прелази у диференцијалну једначину другог реда:

$$\frac{d^2\Phi_{\alpha}(z)}{dz^2} + \frac{1}{C_{\alpha}(z)} \frac{d\Phi_{\alpha}(z)}{dz} \frac{dC_{\alpha}(z)}{dz} - \left[\frac{a_z^2 k^2}{2} - \frac{M(z)}{C_{\alpha}(z)a_z^2} \omega^2 \right] \Phi_{\alpha}(z) = 0. \quad (2.45)$$

Већ је речено да се маса основне матрице мора заменити редукованом масом:

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

где су:

μ_m - маса основне матрице,

μ_c - маса спатерованих атома,

$n(z)$ - број спатерованих атома на месту Z .

Пошто убачени атоми образују „гроздове” може се апроксимирати параболична деформација распореда атомских маса, а, с обзиром на симетричан случај спатеровања, биће:

$$M(z) = A + B\left(z - \frac{L}{2}\right)^2.$$

Коефицијенти A и B одређују се помоћу граничних услова. На границама редукована маса је најмања, а у центру филма постаје једнака маси матрице:

$$M(0) = M(L) = \frac{\mu_m \mu_s}{\mu_s + n\mu_m}; \quad M\left(\frac{L}{2}\right) = \mu_m.$$

На основу ових услова добијају се вредности за A и B , па зависност редуковане масе дуж Z -осе има облик:

$$M(z) = \mu_m - \frac{4\mu_m}{L^2} \left(1 + \frac{\mu_s}{n\mu_m}\right)^{-1} \left(z - \frac{L}{2}\right)^2 \quad (2.46)$$

Спатеровање основне матрице проузрокује и промену константе решетке a_z , исто важи и за константе истезања. У складу са претпостављеном параболичном деформацијом маса, и за константе решетке претпоставља се параболична зависност у Z -правцу:

$$a(z) = C + D\left(z - \frac{L}{2}\right)^2. \quad (2.47)$$

На основу граничних услова:

$$a(0) = a(L) = \frac{a_z}{n}; \quad a\left(\frac{L}{2}\right) = a_z,$$

одређују се непознати коефицијенти C и D :

$$C = a_z; \quad D = \frac{4}{L^2} \left(\frac{a_z}{n} - a_z\right)$$

и њиховим уврштавањем у релацију (2.47) добија се:

$$a(z) = a_z \left[1 - \frac{4(n-1)}{n} \left(\frac{z}{L} - \frac{1}{2} \right)^2 \right]. \quad (2.48)$$

Силе које делују између атома врло брзо опадају са међуатомским растојањем. То аутоматски важи и за константе истезања које опадају са повећањем константе решетке на следећи начин:

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

где је p степен са којим међуатомски потенцијали опадају са растојањем. На основу релације (2.48) следи:

$$C_\alpha(z) = \frac{\text{const.}}{a^p(z)} \left[1 - \frac{4(n-1)}{n} \left(\frac{z}{L} - \frac{1}{2} \right)^2 \right]^{-p} \equiv C_\alpha \left[1 - \frac{4(n-1)}{n} \left(\frac{z}{L} - \frac{1}{2} \right)^2 \right]^{-p}$$

где је C_α константа истезања за неспатеровану матрицу. За велике вредности p , израз у загради са десне стране идентитета може се апроксимирати развојем у ред и задржавањем на прва два члана:

$$\left[1 - \frac{4(n-1)}{n} \left(\frac{z}{L} - \frac{1}{2} \right)^2 \right]^{-p} \approx 1 + p \frac{4(n-1)}{n} \left(\frac{z}{L} - \frac{1}{2} \right)^2.$$

Тако се за константе истезања добија:

$$C_\alpha(z) = C_\alpha \left[1 + p \frac{4(n-1)}{n} \left(\frac{z}{L} - \frac{1}{2} \right)^2 \right]. \quad (2.49)$$

Ради олакшавања даље анализе користиће се усредњене вредности за константе решетке и константе истезања. Усредњавање се врши по дебљини филма L и то на следећи начин:

$$\bar{a}_z = \overline{a(z)} = \frac{1}{L} \int_0^L a(z) dz; \quad \bar{C} = \overline{C_\alpha(z)} = \frac{1}{L} \int_0^L C_\alpha(z) dz.$$

За усредњене вредности (интеграцијом) се добијају следећи обрасци:

$$\bar{a}_z = a_z \frac{2n+1}{3n}; \quad \bar{C} = C_\alpha (1 + p \frac{n-1}{3n}) \quad (2.50)$$

Да би се решила диференцијална једначина (2.45) користи се следећа смена:

$$\frac{1}{2} - \frac{z}{L} = \lambda \xi. \quad (2.51)$$

На основу тога:

$$\frac{d}{dz} = \frac{d\xi}{dz} \frac{d}{d\xi} = -\frac{1}{\lambda L} \frac{d}{d\xi}; \quad \frac{d^2}{dz^2} = \frac{d}{dz} \frac{d}{dz} = \frac{1}{\lambda^2 L^2} \frac{d^2}{d\xi^2}.$$

Убацавањем ових извода у једначину (2.45) добија се следећа њена форма:

$$\frac{1}{\lambda^2 L^2} \frac{d^2 \Phi_\alpha(z)}{d\xi^2} + \frac{1}{C_\alpha(z)} \frac{1}{\lambda^2 L^2} \frac{d\Phi_\alpha(z)}{d\xi} \frac{dC_\alpha(z)}{d\xi} - \left[\frac{a^2 k^2}{a_z^2} - \frac{M_z}{C_\alpha(z) a_z^2} \omega^2 \right] \Phi_\alpha(z) = 0. \quad (2.52)$$

Диференцијална једначина која описује кретање линеарног хармонијског осцилатора је Ермит-Веберова једначина. Познато је да се једнодимензиони низ атома посматра као систем везаних осцилатора који се помоћу одређене унитарне трансформације своди на систем независних осцилатора. У посматраном филму, дуж Z-правца, атоми такође представљају систем везаних линеарних хармонијских осцилатора. Зато је потребно свести једначину (2.52) на Ермит-Веберову једначину. Уместо a_z и $C_\alpha(z)$ узимају се њихове средње вредности (2.50) $a_z \rightarrow \bar{a}_z \rightarrow \bar{a}$; $C_\alpha(z) \rightarrow \bar{C}_\alpha(z) \rightarrow \bar{C}$ и у једначину (2.52) ставља се израз за дистрибуцију масе (2.46). Након сређивања се добија:

$$\Phi'' + \left[-\frac{\lambda^2 L^2}{\bar{a}} a^2 k^2 + \frac{\lambda^2 L^2 \mu_m \omega^2}{\bar{a}^2 \bar{C}} - \frac{4L^2 \lambda^2 \mu_m \rho_n^{-1} \omega^2}{\bar{a}^2 \bar{C}} \zeta \xi^2 \right] \Phi = 0 \quad (2.53)$$

где је: $\rho_n = 1 + \frac{\mu_s}{n\mu_m}.$

Да би се једначина (2.53) свела на Ермит-Веберову, израз који множи ξ^2 проглашава се за јединицу и уводе следећа обележавања:

$$Q = \frac{L\Omega}{2\bar{a}} \left(\frac{\mu_m}{C} \omega - \frac{q^2}{\omega} \right); \quad \xi = \frac{1}{\lambda} \left(\frac{1}{2} - \frac{z}{L} \right);$$

$$\lambda = \left(\frac{\bar{a}}{2L\omega} \sqrt{\frac{C\rho_m}{\mu_m}} \right)^{1/2}; \quad \Omega = \sqrt{\frac{C\rho_m}{\mu_m}}; \quad q = ak.$$

Њиховом употребом добија се тражена Ермит-Веберова једначина * :

$$\frac{d^2\Phi}{d\xi^2} + (Q - \xi^2)\Phi = 0. \quad (2.54)$$

Да би помераји атома били коначни, тј. да се кристал не би „распао”, при произвољној дебљини филма L потребно је да је задовољен следећи услов:

$$Q = 2s+1; \quad s = 0,1,2,\dots \quad (2.55)$$

Овај услов се физички може протумачити као услов физичко-хемијске (кристалографске) стабилности кристала, а математички као услов конвергенције решења. На основу њега се добија израз за могуће осцилаторне фреквенције система:

$$\frac{L\Omega}{2\bar{a}} \left(\frac{\mu_m}{C} \omega - \frac{q^2}{\omega} \right) = 2s+1 \Rightarrow (\omega > 0) \Rightarrow$$

$$\omega \equiv \omega_s(a) = \frac{\bar{a} C (2s+1)}{\mu_m L \Omega} \left[1 + \sqrt{1 + \frac{L^2 \Omega^2 \mu_m}{(2s+1)^2 \bar{a}^2 C^2} q^2} \right]. \quad (2.56)$$

Види се да су фононске фреквенције дискретне и да зависе од свих релевантних параметара система ($L, n, p, \mu_m, \mu_s, a_z$). То је спектар дозвољених фреквенција осциловања атома дуж Z -правца. Минималне вредности ових фреквенција добијају се за $q=0$ и за $s=0$:

$$\omega_0^{\min} = \frac{2\bar{a} C}{\mu_m L \Omega}. \quad (2.57)$$

С обзиром да је $L=N_z a_z$, а на основу образаца (2.50) и израза за Ω , следи:

* Приликом свођења једначине (2.52) на једначину (2.54) нису кориштене граничне једначине (2.38). Ако се ради и са граничним једначинама добијају се резултати који противурече тачним (експериментално потврђеним) резултатима у дискретној анализи. Пошто се анализом без употребе граничних једначина добија слагање резултата континуалне и дискретне анализе, једини излаз је да се граничне једначине не користе. То се може протумачити тиме да се губе разлике између једначина при прелазу на континуум и усредњавањима.

$$\omega_0^{\min} = \frac{2g}{N_z} \sqrt{\frac{G}{\rho_m}} \sqrt{\frac{C_{\alpha\alpha}}{\mu_m}},$$

где су:

$$g = \frac{2n+1}{3n}; \quad G = 1 + p \frac{n-1}{3n},$$

и N_z - број слојева у кристалној структури.

Сад се може израчунати придружена (активациона) температура за фононе помоћу обрасца:

$$T_{ac} = \frac{\hbar \omega_0^{\min}}{k_B}$$

где је k_B Болцманова константа. Активациона температура, тј. минимална температура за екситацију фонона, добиће се за $\alpha = z$, јер је у Z-правцу константа решетке највећа, па је $C_{zz} \ll C_{xx}, C_{yy}$. Тада је:

$$T_{ac}(z) = \frac{\hbar}{k_B} \frac{2g\sqrt{G}}{N_z\sqrt{\rho_m}} \sqrt{\frac{C_{zz}}{\mu_m}}. \quad (2.58)$$

Због недостатка података за Хукове константе истезања за посматране структуре, узимамо:

$$\sqrt{\frac{C_{zz}}{\mu_m}} = \frac{v_z}{a_z}$$

где је v_z брзина звука у правцу Z-осе. Брзину звука v_z и константу решетке a_z процењујемо на следећи начин:

$$v_z = v_o \cdot 10^5 \text{ cm s}^{-1}; \quad v_o \in (1, 5) \quad (2.59)$$

$$a_z = a_o \cdot 10^{-7} \text{ cm} \quad a_o = \begin{cases} \approx 1,2 & \text{за керамике} \\ 0,3 - 0,5 & \text{за метале} \end{cases}$$

На основу ових података добија се коначан израз за активациону температуру:

$$T_{ac}(z) = \frac{\hbar 2g\sqrt{G}}{k_B N_z \sqrt{\rho_m}} \cdot 10^{12} \frac{v_o}{a_o} [K]. \quad (2.60)$$

Код фононских побуђења, у случају молекулских и ковалентних кристала најбоље одговарају Ленард-Донсови потенцијали код којих је $p = 12$. Надаље, у случају слабог допинга, може се узети $n = 3$. Анализа је извршена за *Ba-La-Cu-O* једињења за које је $\rho_m = (0,83)^{-1}$, према објављеним подацима $N_z \approx 100$, $T_{ac} \approx 30$ K.

На основу овог приказа спроведене анализе спектралног понашања фреквенција система, може се лако извести закључак да активациона температура опада са дебљином филма. Упоредивањем са одговарајућим вредностима за недеформисане филмове може се закључити да се спатеровањем филма постиже виша активациона температура.

3. ПЕРТУРБАЦИОНИ ПРОРАЧУН ФОНОНСКИХ ЕНЕРГИЈА У ФИЛМ-СТРУКТУРАМА

Ми ћемо и даље остати у оквиру описаног модела у претходној глави, тј. разма-трамо неку анизотропну тетраедарску структуру са константама решетке a_x , a_y и a_z . Узмимо да у датој структури по елементарној ћелији постоји једна елементарна ексцитација. Хамилтонијан овог система, узет у апроксимацији најближих суседа има следећи изглед за идеални трансляторни непроменљиви кристал:

$$H_{id} = \sum_n \Delta B_n^+ B_n + \sum_{sn} (M_{n;n+\lambda_s} + M_{n;n-\lambda_s}) B_n^+ B_n + \sum_{sn} B_n^+ (R_{n;n+\lambda_s} + R_{n;n-\lambda_s}) B_{n-\lambda_s} \quad (3.1)$$

$$n \equiv (n_x, n_y, n_z); \quad s = x, y, z; \quad n \pm \lambda_x \equiv (n_x \pm 1, n_y, n_z)$$

$$n \pm \lambda_y \equiv (n_x, n_y \pm 1, n_z); \quad n \pm \lambda_z \equiv (n_x, n_y, n_z \pm 1)$$

У једначини (3.1) $\Delta \sim 5 \text{ eV}$ је енергија ексцитације (побуђења) за један изоловани молекул, $M \sim 0.5 \text{ eV}$ и $R \sim 0.1 \text{ eV}$ су матрични елементи оператора за дипол-дипол интеракцију, а Бозе-оператори B^+ и B стварају и анихилишу (поништавају) ексцитације.

Ми ћемо разматрати танак филм са граничним површинама нормалним на z -осу. Претпоставићемо да је филм деформисан само у z правцу. У XY равнима кристал је бесконачно трансляторно инваријантан. За индекс n_z се узимају вредности $0, 1, 2, \dots, N_z$, где је $N_z \sim 100$.

Основни циљ овог рада је да формулише одговарајућу аналитичку методу за анализу танких филмова који су деформисани по целој дебљини. Основна идеја ове методе је структурна деформација као пертурбација. Очигледно је да је овакав приступ применљив једино за слабо деформисане филмове. Јаче деформисане структуре се не могу анализирати овим путем, али са друге стране остаје отворено питање да ли се јако деформисане структуре могу разматрати као кристали. Оне су сличније течним кристалима или аморфним материјалима.

3.1. Пертурбација у недеформисаном филму

На основу чињенице да је филм деформисан само у Z-правцу, величине Δ , M и R постају зависне од индекса n_z . Претпоставићемо следеће зависности:

$$\begin{aligned}
 \Delta &\rightarrow \Delta + \varepsilon(n_z) \\
 M_{n_x n_y n_z; n_x \pm 1, n_y n_z} &= M_x + \alpha_x(n_z) \\
 M_{n_x n_y n_z; n_x n_y n_y \pm 1, n_z} &= M_y + \alpha_y(n_z) \\
 M_{n_x n_y n_z; n_x n_y n_z - 1} &= M_z + \alpha_z(n_z) \\
 R_{n_x n_y n_z; n_x \pm 1, n_y n_z} &= R_x + \beta_x(n_z) \\
 R_{n_x n_y n_z; n_x n_y \pm 1, n_z} &= R_y + \beta_y(n_z) \\
 R_{n_x n_y n_z; n_x n_y n_z - 1} &= R_z + \beta_z(n_z) \cdot \\
 \left| \frac{\varepsilon}{\Delta} \right| \ll 1; \quad \left| \frac{\alpha_s}{M_s} \right| \ll 1; \quad \left| \frac{\beta_s}{R_s} \right| \ll 1; \quad s = x, y, z
 \end{aligned} \tag{3.2}$$

Узимајући у обзир симетричне особине M и R :

$$\begin{aligned}
 M_{n_x n_y n_z + 1; n_x n_y n_z} &= M_{n_x n_y n_z; n_x n_y n_z + 1} = M_z + \alpha_z(n_z + 1) \\
 R_{n_x n_y n_z + 1; n_x n_y n_z} &= R_{n_x n_y n_z; n_x n_y n_z + 1} = R_z + \beta_z(n_z + 1)
 \end{aligned} \tag{3.3}$$

На основу непостојања слојева $n_z = -1$ и $n_z = N_z + 1$, можемо писати:

$$\begin{aligned}
 M_{n_x n_y 0; n_x n_y, -1} &= M_{n_x n_y N_z; n_x n_y N_z + 1} = 0 \\
 R_{n_x n_y 0; n_x n_y, -1} &= R_{n_x n_y N_z; n_x n_y N_z + 1} = 0
 \end{aligned} \tag{3.4}$$

одакле следи:

$$\alpha(0) = \alpha(N_z + 1) = 0; \quad \beta(0) = \beta(N_z + 1) = 0. \tag{3.5}$$

Узимајући у обзир (3.2) - (3.4), Хамилтонијан за танки слабо деформисани филм се може написати у облику:

$$H_f = H_o + H_{int} \tag{3.6}$$

где су:

$$\begin{aligned}
 H_o &= H_o' + H_o'' \\
 H_o' &= \sum_{n_x n_y} \Delta (B_{n_x n_y 0}^+ B_{n_x n_y 0} + B_{n_x n_y N_z}^+ B_{n_x n_y N_z}) + \\
 &+ \sum_{n_x n_y} (2M_x + 2M_y + M_z) (B_{n_x n_y 0}^+ B_{n_x n_y 0} + B_{n_x n_y N_z}^+ B_{n_x n_y N_z}) + \\
 &+ \sum_{n_x n_y} [R_x B_{n_x n_y 0}^+ (B_{n_x+1, n_y 0} + B_{n_x-1, n_y 0}) + R_y B_{n_x n_y 0}^+ (B_{n_x, n_y+1, 0} + B_{n_x, n_y-1, 0}) + \\
 &+ R_x B_{n_x n_y N_z}^+ (B_{n_x+1, n_y, N_z} + B_{n_x-1, n_y, N_z}) + R_y B_{n_x n_y N_z}^+ (B_{n_x, n_y+1, N_z} + B_{n_x, n_y-1, N_z}) + \\
 &R_z B_{n_x n_y 0}^+ B_{n_x n_y 1} + R_z B_{n_x n_y N_z}^+ B_{n_x n_y N_z-1}], \\
 H_o'' &= \sum_{n_x n_y} \sum_{n_z=1}^{N_z-1} \Delta B_{n_x n_y n_z}^+ B_{n_x n_y n_z} + \\
 &+ \sum_{n_x n_y} \sum_{n_z=1}^{N_z-1} (2M_x + 2M_y + 2M_z) B_{n_x n_y n_z}^+ B_{n_x n_y n_z} + \\
 &+ \sum_{n_x n_y} \sum_{n_z=1}^{N_z-1} [R_x B_{n_x n_y n_z}^+ (B_{n_x+1, n_y, n_z} + B_{n_x-1, n_y, n_z}) + \\
 &R_y B_{n_x n_y n_z}^+ (B_{n_x, n_y+1, n_z} + B_{n_x, n_y-1, n_z}) + \\
 &R_z B_{n_x n_y n_z}^+ (B_{n_x, n_y, n_z+1} + B_{n_x, n_y, n_z-1})];
 \end{aligned} \tag{3.7}$$

$$\begin{aligned}
 H_{int} &= H_{int}' + H_{int}'' \\
 H_{int}' &= \sum_{n_x n_y} [\varepsilon(0) B_{n_x n_y 0}^+ B_{n_x n_y 0} + \varepsilon(N_z) B_{n_x n_y N_z}^+ B_{n_x n_y N_z}] + \\
 &+ \sum_{n_x n_y} \{ [2\alpha_x(0) + 2\alpha_y(0) + \alpha_z(1)] B_{n_x n_y 0}^+ B_{n_x n_y 0} + \\
 &+ [2\alpha_x(N_z) + 2\alpha_y(N_z) + \alpha_z(1)] B_{n_x n_y N_z}^+ B_{n_x n_y N_z} \} + \\
 &+ \sum_{n_x n_y} [\beta_x(0) B_{n_x n_y 0}^+ (B_{n_x+1, n_y, 0} + B_{n_x-1, n_y, 0}) + \beta_y(0) B_{n_x n_y 0}^+ (B_{n_x, n_y+1, 0} + \\
 &+ B_{n_x, n_y-1, 0}) + \beta_x(N_z) B_{n_x n_y N_z}^+ (B_{n_x+1, n_y, N_z} + B_{n_x-1, n_y, N_z}) +
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + \beta_y(N_z)B_{n_x n_y N_z}^+ (B_{n_x n_y + 1, N_z} + B_{n_x n_y - 1, N_z}) + \beta_z(1)B_{n_x n_y 0}^+ B_{n_x n_y 1} + \\
 & + \beta_z(N_z)B_{n_x n_y N_z}^+ B_{n_x n_y N_z - 1}], \\
 H_{int}'' & = \sum_{n_x n_y} \sum_{n_z=1}^{N_z-1} \varepsilon(n_z) B_{n_x n_y n_z}^+ B_{n_x n_y n_z} + \\
 & + \sum_{n_x n_y} \sum_{n_z=1}^{N_z-1} [2\alpha_x(n_z) + 2\alpha_y(n_z) + \alpha_z(n_z+1) + \alpha_z(n_z)] B_{n_x n_y n_z}^+ B_{n_x n_y n_z} + \\
 & + \sum_{n_x n_y} \sum_{n_z=1}^{N_z-1} [\beta_x(n_z) B_{n_x n_y n_z}^+ (B_{n_x+1, n_y n_z} + B_{n_x-1, n_y n_z}) + \\
 & \beta_y(n_z) B_{n_x n_y n_z}^+ (B_{n_x n_y + 1, n_z} + B_{n_x n_y - 1, n_z}) + \\
 & + \beta_z(n_z+1) B_{n_x n_y n_z}^+ B_{n_x n_y n_z + 1} + \beta_z(n_z) B_{n_x n_y n_z}^+ B_{n_x n_y n_z - 1}]. \tag{3.8}
 \end{aligned}$$

Из наведених формула се може запазити да су мале деформације ε , α и β укључене у H_{int} а овај део Хамилтонијана H_f ће се третирати као пертурбација.

На основу правила пертурбационе теорије ми ћемо прво решити својствени проблем Хамилтонијана H_0 . Једночестична таласна функција ће бити узета у облику:

$$|\psi\rangle = \sum_{n_x n_y n_z} A_{n_x n_y n_z} B_{n_x n_y n_z}^+ |0\rangle; \quad \sum_{n_x n_y n_z} |A_{n_x n_y n_z}|^2 = 1 \tag{3.9}$$

Примењујући оператор $EB_n - [B_n, H_0]$ на функцију (3.9), добија се следећи систем диференцијалних једначина које дефинишу коефицијенте A :

$$\begin{aligned}
 & [E - (\Delta + 2M_x + 2M_y + M_z)] A_{n_x n_y 0} - R_x(A_{n_x+1, n_y 0} + A_{n_x-1, n_y 0}) - \\
 & - R_y(A_{n_x n_y + 1, 0} + A_{n_x n_y - 1, 0}) - R_z A_{n_x n_y 1} = 0 \\
 & \{ n_z = 0 \} \\
 & [E - (\Delta + 2M_x + 2M_y + 2M_z)] A_{n_x n_y n_z} - R_x(A_{n_x+1, n_y n_z} + A_{n_x-1, n_y n_z}) - \\
 & - R_y(A_{n_x n_y + 1, n_z} + A_{n_x n_y - 1, n_z}) - R_z(A_{n_x n_y n_z + 1} + A_{n_x n_y n_z - 1}) = 0 \\
 & \{ 1 \leq n_z \leq N_z - 1 \} \tag{3.10}
 \end{aligned}$$

$$[E - (\Delta + 2M_x + 2M_y + M_z)] A_{n_x n_y N_z} - R_x (A_{n_x+1 n_y N_z} + A_{n_x-1 n_y N_z}) - R_y (A_{n_x n_y+1 N_z} + A_{n_x n_y-1 N_z}) - R_z A_{n_x n_y N_z-1} = 0$$

$$\{n_z = N_z\}$$

Узимајући у обзир да је систем трансляторно непроменљив у XU равнима, потражићемо решење система (3.10) у следећем облику:

$$A_{n_x n_y n_z} = A_{n_z} e^{i(a_x k_x n_x + a_y k_y n_y)} \quad (3.11)$$

Након замене (3.11) у (3.10) добијамо нови систем диференцијалних једначина, сада по A_{n_z} :

$$\begin{aligned} A_1 + (\rho - \lambda) A_0 &= 0; & n_z &= 0 \\ A_{n_z+1} + A_{n_z-1} + \rho A_{n_z} &= 0; & 1 \leq n_z \leq N_z-1 \\ A_{N_z-1} + (\rho - \lambda) A_{N_z} &= 0; & n_z &= N_z \end{aligned} \quad (3.12)$$

где је

$$\rho = R_z^{-1} [\Delta + 2(M_x + M_y + M_z) + 2(R_x \cos a_x k_x + R_y \cos a_y k_y) - E] \quad (3.13)$$

и

$$\lambda = \frac{M_z}{R_z} \quad (3.14)$$

Секуларна једначина система (3.12) је:

$$X_{N_z+1} = \begin{vmatrix} \rho - \lambda & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & \rho & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \rho & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & \rho & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & \rho & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & \rho - \lambda \end{vmatrix} = 0. \quad (3.15)$$

Детерминанта (3.15) може лако да се изрази преко Чебишевљевих полинома друге врсте:

$$T_n = \begin{vmatrix} \rho & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & \rho & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \rho & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & \rho & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \rho & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & \rho \end{vmatrix} \equiv \frac{\sin(n+1)\xi}{\sin \xi}; \quad (3.16)$$

$$\rho = 2 \cos \xi.$$

Веза између X и T је:

$$X_{N_z+1} = T_{N_z+1} - 2\lambda T_{N_z} + \lambda^2 T_{N_z-1} \quad (3.17)$$

Изједначавањем (3.17) са нулом добија се следећа трансцендентна једначина која дефинише вредности параметра ξ као и вредности параметра ρ . У интервалу $[0, \pi]$ једначина (3.17) има N_z+1 решења за ξ различитих од нуле која ћемо обележити ξ_{ν_z} ; $\nu_z = 1, 2, 3, \dots, N_z+1$.

Пошто је $\rho \rightarrow \rho_{\nu_z} = 2 \cos \xi_{\nu_z}$, помоћу (3.13) енергија ексцитације се може изразити као:

$$E_{k_x k_y k_z} = \Delta + 2(M_x + M_y + M_z) + 2(R_x \cos a_x k_x + R_y \cos a_y k_y - R_z \cos a_z k_z), \quad (3.18)$$

где је

$$k_z = \frac{\xi_{\nu_z}}{a_z}; \quad \nu_z = 1, 2, 3, \dots, N_z+1. \quad (3.19)$$

Коефицијенти $A_{n_z} \rightarrow A_{n_z}^{k_z}$ могу једноставно да се одреде из једначина (3.12). Нормализовано решење је облика:

$$A_{n_z}^{k_z} = N_{k_z} (-1)^{n_z} z [\sin(n_z+1) a_z k_z - \sin n_z a_z k_z]; \quad (3.20)$$

$$N_{k_z} = \sqrt{2} [N_x N_y (N_z+1) (1 - 2 \cos a_z k_z + \lambda^2) + 1 - \lambda^2]^{-1/2}.$$

У сагласности са једначинама (3.9) и (3.20) ортонормирана таласна функција (3.9) посматраног система је:

$$[\psi_{k_x k_y k_z} > = \sum_{n_x n_y n_z} A_{n_x n_y n_z}^{k_x k_y k_z} B_{n_x n_y n_z}^+] 0 > \quad (3.21)$$

$$A_{n_x n_y n_z}^{k_x k_y k_z} = A_{n_z}^{k_z} e^{i(n_x a_x k_x + n_y a_y k_y)}$$

Изрази (3.18) и (3.21) дефинишу енергију и таласну функцију стања у нултој апроксимацији, дакле за непертурбовани систем (описан са H_0). Стандардном процедуром, применићемо теорију временски независних пертурбација и одредити прву поправку на (нулту) енергију (користећи H_{int}).

$$\delta E \equiv \langle \psi_{k_x k_y k_z} | H_{int} | \psi_{k_x k_y k_z} \rangle = 2[(N_z + 1)(1 - 2\lambda \cos a_z k_z + \lambda^2) + 1 - \lambda^2]^{-1}$$

$$\sum_{n_z=0}^{N_z} \{ [\varepsilon(n_z) + 2\alpha_x(n_z) + 2\alpha_y(n_z) + \alpha_z(n_z) + \alpha_z(n_z + 1) +$$

$$+ 2\beta_x(n_z) \cos a_x k_x + 2\beta_y(n_z) \cos a_y k_y] [\sin(n_z + 1) a_z k_z - \lambda \sin n_z a_z k_z] -$$

$$- \alpha_z(n_z) [\sin n_z a_z k_z - \lambda \sin(n_z - 1) a_z k_z] \} [\sin(n_z + 1) a_z k_z - \sin n_z a_z k_z] . \quad (3.22)$$

Пертурбационе поправке вишег реда се могу такође, одредити на стандардан начин, али њихов експлицитни облик овде неће бити дат. Уместо тога ми ћемо дискутовати израз (3.18), који дефинише ексцитационе енергије нултог реда у филму. Овај израз се разликује од одговарајућег израза за идеалну структуру, а разлика постоји у супротном предзнаку члана који је пропорционалан R_z .

Претпостављајући да је $a_x = a_y = a_z \equiv a$, следи да је $M_x = M_y = M_z \equiv M$ и $R_x = R_y = R_z \equiv -|R|$ и користећи апроксимацију малих таласних вектора из (3.18) добијамо:

$$E_f = \Delta + 6M - 2|R| + |R|a^2 k^2 (\sin^2 \theta - \cos^2 \theta) \quad (3.23)$$

где је θ азимутни угао у \vec{k} -простору.

Одговарајућа енергија за идеалне кристале је дата помоћу:

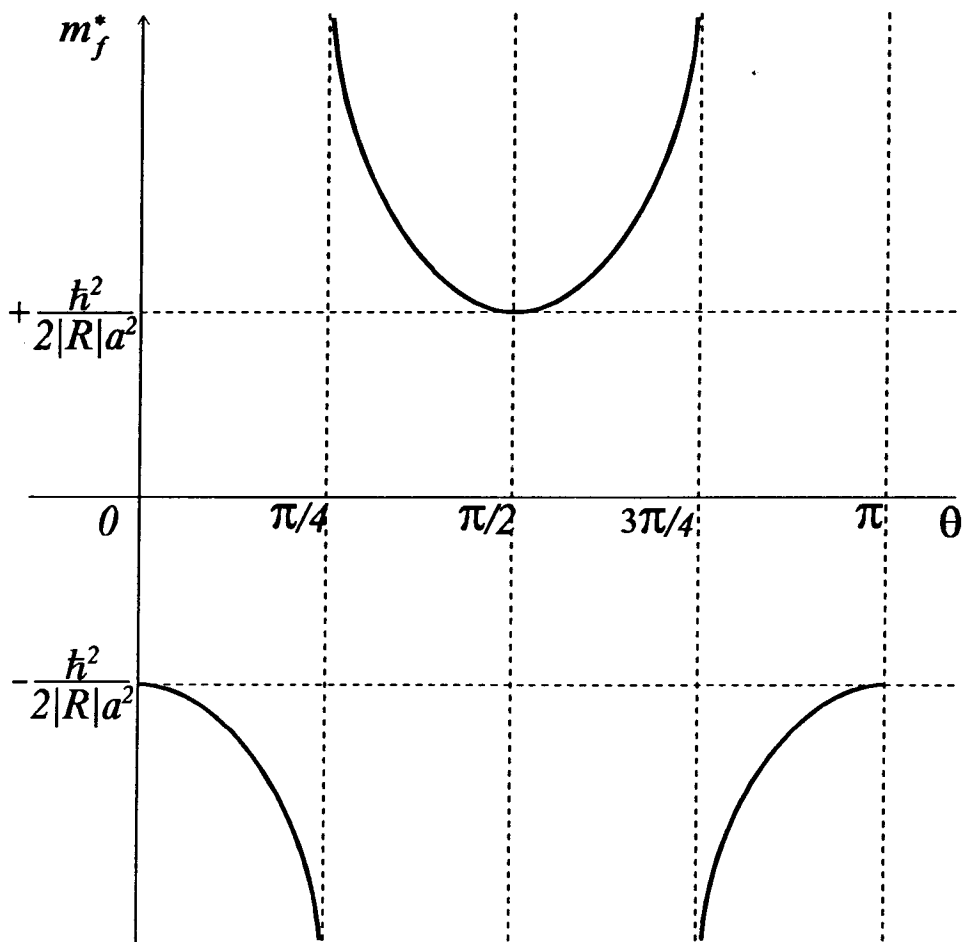
$$E_{id} = \Delta + 6M - 6|R| + |R|a^2 k^2 . \quad (3.24)$$

Ово је у научно-стручној литератури, познат израз. До њега се лако долази, ако се на исти начин као што је урађено са H_0 , реши својствени проблем хамилтонијана H_{id} (3.1).

Поређењем (3.23) и (3.24) може се запазити да је ексцитациони геп у идеалној структури мањи од одговарајућег у филму. Значајнија разлика лежи у чињеници да ефективна ексцитациона маса у филму зависи од угла θ , тј:

$$m_f^*(\theta) \equiv \hbar^2 \left(\frac{\partial^2 E_f}{\partial k^2} \right)^{-1} = \frac{\hbar^2}{2|R|a^2(\sin^2\theta - \cos^2\theta)}. \quad (3.25)$$

На основу тога ексцитациона ефективна маса у филму зависи од правца простирања. За $\pi/4 < \theta < 3\pi/4$ ефективна маса је позитивна и због тога ексцитације имају позитивну дисперзију. За правац простирања који лежи у интервалу $0 \leq \theta < \pi/4$ и $3\pi/4 < \theta \leq \pi$ ексцитације имају негативну ефективну масу и негативну дисперзију. Ексцитације не могу да настају за $\theta = \pi/4$ и за $\theta = 3\pi/4$ јер је њихова ефективна маса тада бесконачна (сл. 3.1).



Слика 3.1

У импулсном \vec{k} - простору постоје, дакле, две подобласти: честична ($m^* > 0$) и античестична ($m^* < 0$). Ове две подобласти подељене су бесконачно неком бесчестичном зоном за $\theta = \pi/4$ и $\theta = 3\pi/4$ (где $m^* \rightarrow \pm\infty$). Ово значи да се у посматраном систему могу јавити истовремено и ексцитације и антиексцитације, али са различитим правцима простирања који се никад не преклапају, односно у овом систему не може доћи до „судара” честице и античестице.

3.2. Пертурбација у деформисаном филму

Да би илустровали могућности општег приступа, ми ћемо размотрити танки молекулски филм који је деформисан нпр. помоћу спољашњег притиска. Претпоставићемо да притисак делује на граничне површине филма са једнаким вредностима на обе површине. На основу тога, константа решетке a_z је симетрично деформисана и постаје функција индекса n_z . Раван симетрије за a_z је средина филма. Због тога се може користити параболични облик функције:

$$a_z(n_z) = P + Q \left(n_z - \frac{N_z - 1}{2} \right)^2 \quad (3.26)$$

где су P и Q неодређени коефицијенти а N_z је напаран број.

Примењени притисак највише мења (смањује) константе решетке између граничних слојева. Зато може да се узме:

$$a_z(0) = a_z(N_z - 1) = (1 - \eta) a_z; \quad 0 < \eta < 1 \quad (3.27)$$

где је a_z константа решетке недеформисаног филма.

Ако претпоставимо да се константа решетке средњег слоја не мења са притиском:

$$a_z\left(\frac{N_z - 1}{2}\right) = a_z \quad (3.28)$$

лако одређујемо функцију (3.26):

$$a_z(n_z) = a_z \left[1 - \eta \left(1 - \frac{2}{N_z - 1} n_z \right)^2 \right]. \quad (3.29)$$

Раније је речено да је M матрични елемент оператора дипол-дипол интеракције. Због тога можемо узети:

$$M_z \rightarrow M_z(n_z) = \frac{M_o}{a_z^3(n_z)} \approx M_z + 3\eta \left(1 - \frac{2}{N_z - 1} n_z \right)^2 M_z + O(\eta^2) \quad (3.30)$$

$$M_z = \frac{M_o}{a_z^3}, \quad \eta \geq 0.$$

Поређењем (3.30) са (3.2) добијамо:

$$\alpha_z(n_z) = 3M_z\eta\left(1 - \frac{2}{N_z-1}n_z\right)^2. \quad (3.31)$$

Да би поједноставили израчунавање претпоставимо да су деформације константе решетке a_x и a_y занемарљиво мале:

$$\alpha_x(n_z) = \alpha_y(n_z) \approx 0. \quad (3.32)$$

Промена матричних елемената R се такође занемарује, пошто су они мањи по вредности од M бар за један ред величине. Због тога:

$$\beta_x(n_z) = \beta_y(n_z) = \beta_z(n_z) \approx 0 \quad (3.33)$$

Може се запазити да притисак не може да мења Δ , па према томе следи:

$$\varepsilon(n_z) = 0 \quad (3.34)$$

Енергија ексцитације настала примењеним притиском може се израчунати из (3.22) и након замена (3.31) – (3.34) добијамо:

$$\begin{aligned} \delta E = & \frac{6\eta M_z}{(N_z-1)^2} [(N_z+1)(1-2\lambda \cos a_z k_z + \lambda^2) + 1 - \lambda^2]^{-1} \times \\ & \times \sum_{n_z=0}^{N_z} [(N_z-1-2n_z)^2 + (N_z-3-2n_z)^2] [\sin(n_z+1)a_z k_z - \lambda \sin n_z a_z k_z]^2. \end{aligned} \quad (3.35)$$

Ова формула се може поједноставити јер је $\lambda = M_z / R_z \gg 1$. Занемаривањем малих чланова вишег реда у (3.35) добијамо апроксимативно:

$$\delta E \approx \frac{6\eta M_z}{N_z(N_z-1)^2} (S_1 - S_2 - S_3), \quad (3.36)$$

где су:

$$\begin{aligned}
S_1 &= 2(N_z^2 - 4N_z + 5) \sum_{n_z=0}^{N_z} \sin^2 n_z a_z k_z, \\
S_2 &= 8(N_z - 2) \sum_{n_z=0}^{N_z} n_z \sin^2 n_z a_z k_z, \\
S_3 &= 8 \sum_{n_z=0}^{N_z} n_z^2 \sin^2 n_z a_z k_z.
\end{aligned} \tag{3.37}$$

Суме у једначинама (3.36) се могу израчунати лако, али егзактни изрази су веома компликовани. Узимајући у обзир да реални филмови могу да буду $N_z \leq 1000$, можемо да поједноставимо ове изразе

$$S_1 \approx N_z^3; \quad S_2 \approx 2N_z^3; \quad S_3 \approx \frac{4}{3}N_z^3. \tag{3.38}$$

Након замене (3.38) у (3.36), коначно добијамо:

$$\delta E = 2\eta M_z. \tag{3.39}$$

За процену промене вредности енергије (3.39) може се узети $M_z \approx 0.1 \text{ eV}$ и $\eta \approx 0.1$ (најниже стање средњих вредности за граничне константе решетке $a_z(0) = a_z(N_z - 1) = (\%10) a_z$ је важеће, тј. она се под притиском скраћује за десет процена) што доводи до:

$$\delta E = 0.02 \text{ eV}. \tag{3.40}$$

Енергији δE одговара електромагнетно зрачење таласне дужине око 60.000 nm што је у опсегу далеког инфрацрвеног зрачења.

Могућа примена последњих добијених резултата се састоји у следећем. Може се са сигурношћу очекивати да ће филм илуминисати добијену енергију δE након престанка деловања притиска. Ако се притисак саопштава периодично са временом, филм постаје периодични емитер инфрацрвеног зрачења, тј. може да послужи као трансформатор механичке енергије у електромагнетну који ради у периодичном режиму.

4. ЗАКЉУЧАК

Најважнији резултати проведених анализа који су у овом раду презентирани могу се сумирати у следећем виду.

- 1) Формулисан је општи аналитички метод анализе деформисаног танког филма. Овај метод је заснован на претпоставци да се деформације могу третирати као пертурбације, у случају слабог нарушења транслационе симетрије кристалног филма.
- 2) Примена овог метода за прорачун енергија ексцитација у танком филму показује да ове ексцитације могу да мењају знак ефективне масе и зависе од правца простирања.
У импулсном \vec{k} - простору постоје, дакле, две подобласти: честична ($M^* > 0$) и античестична ($m^* < 0$). Ове две подобласти подељене су бесконачно неком бесчестичном зоном за $\theta = \pi/4$ и $\theta = 3\pi/4$ (где $m^* \rightarrow \pm \infty$). Ово значи да се у посматраном систему могу јавити истовремено и ексцитације и антиексцитације, али са различитим правцима простирања који се никад не преклапају, односно у овом систему не може доћи до „судара” честице и античестице.
- 3) Као специјалан случај, анализиран је утицај спољашњег притиска на спектар ексцитација. Показано је да филм може да „ради” као периодични трансформатор механичке у електромагнетну енергију ако се притисак саопштава и прекида периодично. Електромагнетни таласи, добијени на овај начин се налазе у инфрацрвеном подручју.

5. ЛИТЕРАТУРА

1. Б. С. Тошић, *Статистичка физика*, ПМФ ИФ, Нови Сад 1978.
2. С. Kittel, *Увод у физику чврстог стања*, Савремена администрација, Београд 1970.
3. И. Супек, *Теоријска физика и структура материје - II дио*, Школска књига, Загреб 1990.
4. А. С. Давидов, *Теорија тврдог тела*, Наука, Москва 1976.
5. Б. С. Тошић, Ј. П. Шетрајчић, Р. П. Ђајић и Д. Љ. Мирјанић, *Phys. Rev. B* 36 (1987) 9094
6. Д. Раковић, *Физички основи електротехничких материјала*, ЕТФ, Београд 1995.
7. Љ. Ристовски, *Теорија кондензованог стања*, Физ. факултет, Београд 1994.
8. Ј. Р. Šetrajić, В. С. Тошић, S. Lazarev, М. Pantić, А. S. Utješanović, V. M. Zorić, N. V. Delić, D. Lj. Mirjanić and Z. Rajilić, *Dispersion Low and States of Phonons in Thin Crystalline Films*, *Int. J. Mod. Phys. B*, прихваћено за штампу (1996.).