

ПРИМЉЕНО	24 XI 1998
ОРГАНИЗ.ЈЕД.	БРОЈ
0603	9/304

UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET
INSTITUT ZA FIZIKU

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

ELEKTRONSKI SPEKTRI U SUPERREŠETKAMA

M E N T O R

P R O F . D R J O V A N Š E T R A J Č I Ć

K A N D I D A T

I R E N J U N G E R

Novi Sad, 1998. godine

*„Lepota traženja nije u nalaženju,
nego u našoj odluci da tražimo.”*

M.Antić

Najtoplje se zahvaljujem svom mentoru prof. dr Jovanu Šetrajčiću, koleginici mr Sladjani Stojković i kolegi Igoru Vragoviću na velikoj pomoći prilikom izrade ovoga rada. Takodje se zahvaljujem svim prijateljima i kolegama, koji su mi nesebično pomagali. Posebnu zahvalnost dugujem svojim roditeljima koji su mi pružili podršku i razumevanje.

Sadržaj

1	Uvod	4
2	Elektroni u kristalima	5
2.1	Model kvazislobodnih elektrona	5
2.1.1	Energetske zone	5
2.1.2	Brzina, ubrzanje i efektivna masa	8
2.1.3	Statistika kvazislobodnih nosilaca	9
2.2	Spektri i stanja elektrona u neograničenim kristalima	10
2.3	Elektroni u tankim filmovima	11
2.3.1	Modelni hamiltonijan	11
2.3.2	Zakon disperzije	13
3	Elektroni u superrešetkama	15
3.1	Model superrešetke	16
3.2	Jednačine kretanja	18
3.3	Zakon disperzije elektrona	22
3.4	Energetski gepovi i zabranjene zone	26
4	Zaključak	28
5	Literatura	29

1 Uvod

Za modernu nauku o materijalima [1,2] danas je najznačajnije precizno strukturiranje materijala do dimenzija reda veličine nanometara, posebno na polju elektronike, optoelektronike i visokotemperaturske superprovodnosti. Teorijska i eksperimentalna istraživanja osobina niskodimenzionih sistema (superrešetke¹, tanki filmovi, kvantne žice i kvantne tačke), postala su u poslednjoj deceniji veoma intenzivna pa bi se moglo reći da predstavljaju jedan od udarnih pravaca istraživanja u savremenoj fizici kondezovane materije [2-4]. Razlozi interesovanja za ovakve sisteme, kao realnije strukture od neograničenih, su mnogobrojni. Fenomeni povezani sa tako malim dimenzijama dovode do pojave novih i drugačijih, odnosno izmenjenih osobina materijala i specifičnih pojava [1-5] što je interesantno ne samo sa fundamentalnog fizičkog stanovišta, već su takve strukture od šireg praktičnog značaja.

Poseban interes za proučavanjem superrešetki pojavio se nakon otkrića da su visokotemperaturski keramički superprovodnici izrazito slojevite strukture u kojima je dominantna pojava periodični raspored CuO_2 ravni [5]. Zbog periodičnog ponavljanja osnovnog motiva duž privilegovanog pravca javljaju se podzone u elektronskom spektru superrešetke [4]. Naglim razvojem tehnike njihovog sintetizovanja danas se bez teškoća mogu napraviti superrešetke nanometarskih dimenzija. Novije eksperimentalne tehnike kao što su epitaksija molekulskim snopom i napravljivanje iz metal organskih jedinjenja, izvanredno su usavršene tako da se parametri strukture mogu menjati po volji [1,4,5].

Od velikog značaja za teoriju čvrstog stanja je ispitivanje u dela i uticaja elektronskog pod-sistema na fizičke karakteristike materijala, jer su upravo elektroni nosioci svih transportnih i drugih fizički interesantnih procesa [6-8]. U ovom radu analizirani su elektronski spektri u kristalnim superrešetkama. Istraženi su uticaji parametara superrešetke (odnos elektronskih transfera, broj slojeva i x/y komponente talasnog vektora) na energetski spektar i moguća stanja elektrona (promene u zakonu disperzije).

Pomenuta analiza vršena je korišćenjem metoda dvovremenskih temperaturnih Grinovih funkcija² koji se danas veoma često koristi u kvantnoj teoriji čvrstog stanja. Zahvaljujući ugradnjenoj statistici, taj metod se uspešno primenjuje kod izračunavanja kako mikroskopskih tako i makroskopskih, ravnotežnih i neravnotežnih svojstava kristala [8,9]. Primenjeni metod je odabran zbog pogodnosti koje nam nudi definicija polova Grinovih funkcija³.

Da bi se izučile posebnosti karakteristika elektrona u superrešetkama, moraju se prethodno spomenuti te iste karakteristike u neograničenim kristalnim strukturama i tankim filmovima⁴ (što je učinjeno u glavi 2 ovog rada) i na osnovu toga izvršiti poređenje ovih struktura.

¹ Ultratanke slojevite strukture tipa $(AC)_m(BC)_n$, koje sadrže naizmenično m slojeva dvokomponentnog jedinjenja AC i n slojeva jedinjenja BC duž specifičnog pravca rasta su tipičan primer superrešetki [3].

² Postoje i drugi metodi pomoću kojih se ovaj problem može tretirati: metod Hajzenbergovih jednačina kretanja, metod malih perturbacija, metod talasnih funkcija i sl. [7,8].

³ 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.

⁴ Analiza je sprovedena u ranijim radovima [10-13] metodom Grinovih funkcija.

2 Elektroni u kristalima

Translaciona invarijantnost idealnih kristalnih struktura [1,7] nameće periodičan (sa periodom kristalne rešetke) oblik mnogim fizičkim veličinama koje ih opisuju (na primer, 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 obrazovanju kristalne strukture. U ovom procesu periodično polje kristala i interakcija medju atomima dovodi do cepanja energetskih nivoa elektrona slobodnih atoma. Pošto se kristal može tretirati kao gigantski molekul, to kvantna stanja elektrona u tom molekulu, zbog Paulijevog principa isključenja, moraju biti okarakterisana različitim kvantnim brojevima što ima za posledicu formiranje čitavog spektra energetskih nivoa na mestu jednog nivoa u izolovanom atomu [4,6,7]. 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 način atomi povezuju u kristal - gigantski molekul.

Ovi kolektivizirani elektroni, kojima se inače opisuju najkarakterističnija svojstva metala, nisu vezani sa atomima kristalne rešetke i mogu da se premeštaju po celoj zapremini metala. Međutim, čak i kada elektron napusti atom u kristalu, on se pod dejstvom primjenjenog električnog polja ne kreće slobodno već je podvrgnut uticaju kristalnog polja. Ovaj uticaj se može usrednjeno uzeti u obzir uvodjenjem efektivne mase kvazislobodnih nosilaca nanelektrisanja [1,6,7]. Takođe, zbog specifičnosti kretanja elektrona u kristalnom polju, anomalnog ponašanja kvazislobodnih elektrona na krajevima valentne zone, uvodi se pojam kvazislobodnih nosilaca nanelektrisanja - šupljina.

2.1 Model kvazislobodnih elektrona

Veliki broj važnih fizičkih osobina mogu se razumeti polazeći od modela slobodnih elektrona po kome se najslabije vezani elektroni atoma kreću slobodno po zapremini metala. Valentni elektroni postaju provodnici elektriciteta i nazivaju se provodni elektroni. Sile izmedju provodnih elektrona i jona se zanemaruju, tj. smatra se da se provodni elektroni mogu kretati svuda u unutrašnjosti uzorka. Ukupna energija je jednaka kinetičkoj, što znači da se potencijalna ne uzima u obzir [1,6,7]. Klasična teorija je imala nekoliko uspeha, ali i nedostataka. U uspehe spadaju izvodjenje Omovog zakona ($\vec{j} = \sigma \vec{E}$) i izvodjenje veze izmedju električne i toplotne provodnosti. Međutim, totalni neuspeh je doživel u objašnjenju toplotnog kapaciteta i paramagnetne susceptibilnosti provodnih elektrona. Zatim, pomoću klasične teorije ne može da se objasni postojanje dugog slobodnog puta elektrona. Pomenute pojave uspešno se opisuju pomoću modela kvazislobodnih elektrona.

2.1.1 Energetske zone

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

Dozvoljene vrednosti energije slobodnog elektrona se protežu neprekidno od nula do besko-

načno:

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

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

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

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

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

Oblasti vrednosti talasnog vektora k pri kojima se energija elektrona E menja neprekidno, a na granicama doživljava prekid, nazivaju se Briluenovim zonama.

Oblast u k -prostoru izmedju $-\frac{\pi}{a}$ i $+\frac{\pi}{a}$ se naziva prvom Briluenovom zonom. Zbog periodičnosti kristala fizički su neekvivalentne samo tačke recipročnog k -prostora koje pripadaju prvoj Briluenovoj zoni, dok su fizički ekvivalentne sve vrednosti talasnog vektora \vec{k}' i \vec{k} koje se razlikuju za vektor translacije recipročne rešetke \vec{K} : $\vec{k}' = \vec{k} + \vec{K}$, gde \vec{k} pripada prvoj Briluenovoj zoni. U jednodimenzionom slučaju intenzitet vektora \vec{K} je celobrojni umnožak intenziteta primitivnog vektora recipročne rešetke [1,7,8], pa se stanja elektrona sa vrednostima talasnog vektora inteziteta k i talasnih vektora inteziteta k' ($\vec{k}' = \vec{k} + n\frac{2\pi}{a}, n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$) fizički ne razlikuju. To daje mogućnost da se sve Briluenove zone svedu na prvu zonu.

Za kristal konačnih dimenzija Born-Karmanovi ciklični uslovi [1,7,8] daju diskretne⁵ vrednosti kvazitalasnog vektora unutar prve Briluenove zone:

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

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

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

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

Širina dozvoljene zone se može proceniti pomoću Hajzenbergove relacije neodredjenosti:

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

⁵ U slučaju kristala dovoljno velikih razmera može se smatrati da je k_i kvazineprekidno [1].

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

U toku obrazovanja čvrstog tela elektroni se kolektiviziraju prolazći kroz potencijalne barijere tunel efektom. Prozračnost pravougaone barijere⁶ se procenjuje kao [1]:

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

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

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

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

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

Srednje vreme pripadanja elektrona datom atomu je

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

tako da se za širinu dozvoljenih zona dobija

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

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

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

Prema veličini energetskog procepa materijali se dele na provodne i na neprovodne [1,5].

Provodni materijali imaju nezauzete energetske nivoe koji leže neposredno iznad zauzetih valentnih nivoa. Postoje dve vrste provodnika:

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

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

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

⁶Relativni odnos propuštenog i upadnog elektronskog fluksa.

2.1.2 Brzina, ubrzanje i efektivna masa

Kako kvazislobodni elektroni u metalu čine degenerisan gas, odnosno, podvrgavaju se kvantnoj Fermi-Dirakovojoj statistici, potrebno je napustiti klasičnu predstavu elektrona kao čestice i posmatrati njegovu dualnu (čestično-talasnu) kvantomehaničku prirodu [1,5-8].

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

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

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

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

pa se na osnovu toga dobija izraz za ubrzanje elektrona:

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

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

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

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

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

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

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

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

Zavisno od zakrivljenosti energetske površine, efektivna masa može da bude negativna ili pozitivna (što odgovara elektronima ili šupljinama, respektivno). Ubrzanje nosioca nanelektrisanja u kristalnoj rešetki određeno je, ne slobodnom elektronskom masom, već skupom veličina (2.14) 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.

Ove anomalne oblasti ($m^* < 0$) mogu da se objasne posmatrajući kretanje elektrona pod dejstvom konstantnog spoljašnjeg električnog polja \vec{E} . Ako je pre uključenja polja \vec{E} njegova energija bila jednaka nuli (tj. nalazi se u centru Briluenove zone), posle priključenja \vec{E} , na elektron počinje da deluje konstantna sila $-e\vec{E}$, pa kvaziimpuls elektrona linearno raste sa vremenom.

Svaki put kada elektron dostigne granicu Briluenove zone $k = +\pi/a$ njegov kvaziimpuls se skokovito menja u suprotni ($k = -\pi/a$). Takvu skokovitu promenu doživljava i brzina elektrona: pozitivnim vrednostima brzine odgovara kretanje elektrona u pravcu delovanja sile, a negativnim nasuprot delovanju te sile. Dakle, kretanje elektrona u kristalu ima oscilatorni karakter. Oblasti negativne mase odgovaraju situaciji da se elektron usporava iako na njega deluje spoljašnja sila sa težnjom da mu poveća brzinu ($k' < k < \pi/a$), odnosno ubrzava iako spoljašnja sila teži da mu smanji brzinu ($-\pi/a < k < -k'$). Medutim, u toj oblasti faznog \vec{k} -prostora negativno nanelektrisani elektron negativne mase, može da se tretira kao pozitivno nanelektrisana čestica pozitivne mase - šupljina koja se kreće u skladu sa delovanjem polja $+e\vec{E}$. Prema tome, vidi se da se stanje u zoni može opisati prisustvom kvazičestice koja poseduje istu količinu nanelektrisanja kao i elektron, samo suprotnog predznaka. Tim kvazičesticama pripisani su talasni vektori nezauzetih kvantnih stanja, pa se nazivaju šupljinama. Njihov smer kretanja u spoljašnjem polju je suprotan od smera kretanja elektrona. Promena predznaka nanelektrisanja ne utiče na izraz za ubrzanje ako se istovremeno promeni i predznak efektivne mase. Kako je masa elektrona pri vrhu zone negativna, efektivna masa šupljina je pozitivna. Znači, šupljine su kvazičestice pozitivnog nanelektrisanja i pozitivne mase. Dakle, kretanje elektrona na krajevima zona može da se posmatra i kao kretanje pozitivno nanelektrisanih šupljina [1].

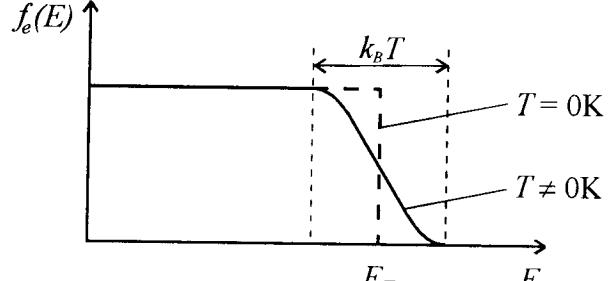
2.1.3 Statistika kvazislobodnih nosilaca

Raspodela elektrona u kristalu po energijama, pri nekoj temperaturi T , pokorava se Fermi-Dirakovoj statistici [1,6]:

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

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

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



Slika 2.1: Fermijeva funkcija pri $T = 0$ i $T \neq 0$

Temperatura pridružena Fermijevoj energiji naziva se temperatura degeneracije. Elektronski gas je degenerisan u području gde važi : $T \leq T_F$. Sa porastom temperature jedan deo elektrona se pobudi i prelazi na više energetske nivoe. Verovatnoća nalaženja elektrona na nižim nivoima $E < E_F$ se smanji, ali se za isto toliko poveća verovatnoća nalaženja elektrona na višim nivoima $E > E_F$. Granica popunjenoosti se rasplinjava za veličinu $k_B T$ (slika 2.1). Za sve temperature iznad apsolutne nule uvek važi $f(E_F) = \frac{1}{2}$.

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

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

2.2 Spektri i stanja elektrona u neograničenim kristalima

Ovde su razmotrena neka svojstva elektronskog podsistema idealnog beskonačnog kubnog kristala polazeći od hamiltonijana kvazislobodnih elektrona [7,8] koji u konfiguracionom prostoru i harmonijskoj aproksimaciji ima oblik:

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

gde su $a_{\vec{n}}^+$ i $a_{\vec{n}}$ - kreacioni i anihilacioni operatori elektrona na čvoru \vec{n} rešetke. Veličina $\Delta_{\vec{n}}$ predstavlja energiju elektrona lokalizovanog na čvoru \vec{n} , a veličine $W_{\vec{n}, \vec{m}}$ - su matrični elementi elektronskog transfera sa čvora \vec{n} na čvor \vec{m} . Ovde je prepostavljeno da je broj elektrona po atomu relativno mali (jedan elektron po atomu) tako da se Kulonova interakcija elektrona može zanemariti. U tom slučaju, lako se pokazuje da je hamiltonijan (2.18) ekvivalentan hamiltonijanu elektronskog gasa u aproksimaciji efektivne mase [6,7]:

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

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

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

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

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

Svojstva posmatranog elektronskog sistema analiziraju se pomoću antikomutatorske Grinove funkcije [9,10]

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

koja zadovoljava jednačinu kretanja:

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

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

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

Tako da jednačina kretanja dobija sledeći oblik:

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

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

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

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

gde je $N \equiv N_x N_y N_z$. Njihovom zamenom u jednačinu kretanja, dobija se:

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

odakle dalje sledi $G_{\vec{k}}(\omega) = \frac{i}{2\pi} \frac{1}{\omega - \omega_{\vec{k}}} \equiv \frac{i\hbar}{2\pi} \frac{1}{E - E_{\vec{k}}}$, gde

$$E_{\vec{k}} = \hbar \omega_{\vec{k}} = \Delta - 2W(\cos ak_x + \cos ak_y + \cos ak_z) \quad (2.28)$$

predstavlja zakon disperzije vezanih elektrona [10]. Zakon disperzije slabo vezanih elektrona (degenerisan elektronski gas), $\Delta = 6W$ je:

$$E_{\vec{k}} = 4W \left(\sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y}{2} + \sin^2 \frac{ak_z}{2} \right). \quad (2.29)$$

odnosno:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{\vec{k}} \equiv \frac{E_{\vec{k}}}{4W} &= \mathcal{F}_{k_x k_y} + \mathcal{G}_{k_z}, \\ \mathcal{F}_{k_x k_y} &= \sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y}{2}; \quad \mathcal{G}_{k_z} = \sin^2 \frac{ak_z}{2}, \end{aligned} \quad (2.30)$$

2.3 Elektroni u tankim filmovima

Istim pristupom kao kod neograničenih kristalnih sistema može se doći do zakona disperzije u film strukturama⁷.

2.3.1 Modelni hamiltonijan

Hamiltonijan vezanih elektrona u tankim kristalnim filmovima može se formirati polazeći od „balkovskog” hamiltonijana (2.18), odnosno (2.21). Pošto su granične površine filma uzete normalno na z -pravac, indeks sloja n_z - uzima vrednosti $n_z = 0, 1, 2, \dots, N_z$, gde je $N_z \in [2, 20]$ kod ultratankih filmova. Indeksi n_x i n_y , koji određuju položaj atoma u svakom sloju mogu imati proizvoljne celobrojne vrednosti (praktično, od $-\infty$, do $+\infty$).

Za razliku od idealnih beskonačnih struktura, realni kristali ne poseduju osobinu translacione invarijantnosti. Postojanje izvesnih graničnih uslova, jedan je od uzroka narušenja simetrije [11-13]. Posmatra se idealni tanki film kubne kristalne strukture, načinjen na substratu nekim tehničko-tehnološkim postupkom (nапаравањем, сптеровањем и сл.). Pojam idealni film koristi se u smislu nenarušenja kristalne strukture (bez prisustva defekata, primesa i sl.), a ne u smislu prostorne neograničenosti [10-13]. Dimenzije filma su takve da je on u XY ravnima beskonačan,

⁷Filmovi predstavljaju beskonačne strukture u svim kristalnim ravnima paralelnim dvema graničnim površima, koje su normalne na jedan prioritetan pravac u prostoru, duž koga je posmatrani sistem ograničen.

a u z pravcima ima konačnu debljinu (L). Znači da ovaj film poseduje dve beskonačne granične površine paralelne XY ravnima i to za: $z = 0$ i $z = L$.

Zbog izmenjenih uslova na granicama filma [10-13], uzima se da je:

$$\begin{aligned} \Delta_{n_x n_y n_z}^{(n_z < 0; n_z > N_z)} &= 0 ; & \Delta_{n_x n_y n_z}^{(1 \leq n_z \leq N_z - 1)} &= \Delta \\ \Delta_{n_x n_y 0} &= \Delta (1 + \varepsilon_1) ; & \Delta_{n_x n_y N_z} &= \Delta (1 + \varepsilon_2) , \end{aligned} \quad (2.31)$$

gde je Δ energija elektrona na čvoru kod beskonačnog kristala. Površinski parametri ε_1 i ε_2 (koji mogu biti > 0 i/ili < 0) izražavaju relativnu promenu ove energije na granicama filma. Matrični elementi elektronskog preskoka sa sloja na sloj [10-13], mogu se izraziti kao:

$$\begin{aligned} W_{n_x n_y n_z; n_x \pm 1, n_y n_z}^{(0 \leq n_z \leq N_z)} &= W_{n_x n_y n_z; n_x n_y \pm 1, n_z}^{(0 \leq n_z \leq N_z)} = W_{n_x n_y n_z; n_x n_y n_z + 1}^{(0 < n_z < N_z - 1)} = W_{n_x n_y n_z; n_x n_y n_z - 1}^{(1 < n_z < N_z)} \equiv W \\ W_{n_x n_y 0; n_x n_y 1} &= W(1 + w_1) ; & W_{n_x n_y N_z - 1; n_x n_y N_z} &= W(1 + w_2) \\ W_{n_x n_y n_z; n_x n_y n_z - 1}^{(n_z \leq 0)} &= W_{n_x n_y n_z; n_x n_y n_z + 1}^{(n_z \geq N_z)} = 0 , \end{aligned} \quad (2.32)$$

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.

Elektronski hamiltonijan tankih kristalnih filmova može se napisati u obliku:

$$\begin{aligned} H &= H_z + H_p , \\ H_z &= \sum_{m_x m_y} \sum_{m_z=2}^{N_z-2} a_{m_x m_y m_z}^+ [\Delta a_{m_x m_y m_z} - W (a_{m_x+1, m_y m_z} + a_{m_x-1, m_y m_z} + \\ &\quad + a_{m_x m_y+1, m_z} + a_{m_x m_y-1, m_z} + a_{m_x m_y m_z+1} + a_{m_x m_y m_z-1})] ; \\ H_p &= \sum_{m_x m_y} \left\{ a_{m_x m_y 0}^+ [(1 + \varepsilon_1) \Delta a_{m_x m_y 0} - W(1 + w_1) a_{m_x m_y 1}] + \right. \\ &\quad + a_{m_x m_y 1}^+ [\Delta a_{m_x m_y 1} - W(1 + w_1) a_{m_x m_y 0} - W a_{m_x m_y 2}] + \\ &\quad + a_{m_x m_y N_z-1}^+ [\Delta a_{m_x m_y N_z-1} - W(1 + w_2) a_{m_x m_y N_z} - W a_{m_x m_y N_z-2}] + \\ &\quad + a_{m_x m_y N_z}^+ [(1 + \varepsilon_2) \Delta a_{m_x m_y N_z} - W(1 + w_2) a_{m_x m_y N_z-1}] - \\ &\quad - W a_{m_x m_y 0}^+ (a_{m_x+1, m_y 0} + a_{m_x-1, m_y 0} + a_{m_x m_y+1, 0} + a_{m_x m_y-1, 0}) - \\ &\quad - W a_{m_x m_y 1}^+ (a_{m_x+1, m_y 1} + a_{m_x-1, m_y 1} + a_{m_x m_y+1, 1} + a_{m_x m_y-1, 1}) - \\ &\quad - W a_{m_x m_y N_z-1}^+ (a_{m_x+1, m_y N_z-1} + a_{m_x-1, m_y N_z-1} + a_{m_x m_y+1, N_z-1} + a_{m_x m_y-1, N_z-1}) - \\ &\quad \left. - W a_{m_x m_y N_z}^+ (a_{m_x+1, m_y N_z} + a_{m_x-1, m_y N_z} + a_{m_x m_y+1, N_z} + a_{m_x m_y-1, N_z}) \right\} . \end{aligned} \quad (2.33)$$

Pomoću tako definisanog hamiltonijana, mogu se izračunati jednočestične antikomutatorske Grinove funkcije⁸ (2.22) sličnom mikroteorijskom procedurom kao kod neograničenih kristala. Razlika je u tome što se ovde vrši vremenska i delimična prostorna Furije transformacija. Prostorna Furije-transformacija mora biti delimična $(n_x n_y n_z) \rightarrow (k_x, k_y, n_z)$ jer je posmatrani sistem ograničen duž z -pravca:

$$\begin{aligned} G_{n_x n_y n_z; \vec{m}}(t) &= \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i[k_x a_x(n_x - m_x) + k_y a_y(n_y - m_y)]} e^{-i\omega t} G_{n_z; m_z}(k_x, k_y; \omega) , \\ \delta_{n_x m_x} \delta_{n_y m_y} \delta_{n_z m_z} &= \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} e^{i[k_x a_x(n_x - m_x) + k_y a_y(n_y - m_y)]} \delta_{n_z m_z} , \end{aligned} \quad (2.34)$$

⁸Grinove funkcije određuju ravnotežna svojstva elektrona u tankim kristalnim filmovima [9].

(gde je: $n_z = 0, 1, 2, \dots, N_z$ i $a_x = a_y = a$), te zamenom gornjih transformacija u jednačinu kretanja (2.23) dobija se sistem jednačina :

$$\begin{aligned}
 (\varrho - \frac{\Delta}{W} \varepsilon_1) G_0 + (1 + w_1) G_1 &= \mathcal{K}_0 \\
 (1 + w_1) G_0 + \varrho G_1 + G_2 &= \mathcal{K}_1 \\
 G_1 + \varrho G_2 + G_3 &= \mathcal{K}_2 \\
 &\vdots && \vdots && \vdots \\
 G_{n_z-1} + \varrho G_{n_z} + G_{n_z+1} &= \mathcal{K}_{n_z} \\
 &\vdots && \vdots && \vdots \\
 G_{N_z-3} + \varrho G_{N_z-2} + G_{N_z-1} &= \mathcal{K}_{N_z-2} \\
 G_{N_z-2} + \varrho G_{N_z-1} + (1 + w_2) G_{N_z} &= \mathcal{K}_{N_z-1} \\
 (1 + w_2) G_{N_z-1} + (\varrho - \frac{\Delta}{W} \varepsilon_2) G_{N_z} &= \mathcal{K}_{N_z}
 \end{aligned} \tag{2.35}$$

Gde su uvedene oznake:

$$\begin{aligned}
 \varrho &= \hbar \frac{\omega}{W} - \frac{\Delta}{W} + 2(\cos k_x + \cos k_y) ; \\
 G_{n_z, m_z}(k_x, k_y; \omega) &\equiv G_{n_z} ; \quad \mathcal{K}_{n_z} = \frac{i\hbar}{2\pi W} \delta_{n_z, m_z}
 \end{aligned} \tag{2.36}$$

(indeks m_z je „parazitski“ [9], pa je ovde izbačen).

Ovaj sistem diferencnih algebarskih jednačina sadrži $N_z + 1$ nepoznatih Grinovih funkcija: $G_0, G_1, G_2, \dots, G_{N_z}$. Na osnovu opštih algebarskih stavova, jasno je da se nepoznate mogu izraziti kao:

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

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

U cilju odredjivanja elektronskih energija, potrebni su nam polovi Grinovih funkcija [9], koji se dobijaju kada iste teže beskonačnosti, što znači da mora biti:

$$\mathcal{D}_{N_z+1} \equiv 0, \tag{2.37}$$

Determinanta sistema (2.35) može da se napiše u razvijenom obliku:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{D}_{N_z+1}(\varrho) &= \left(\varrho - \frac{\Delta}{W} \varepsilon_1 \right) \left(\varrho - \frac{\Delta}{W} \varepsilon_2 \right) \mathcal{P}_{N_z-1} - \left[(1 + w_1)^2 \left(\varrho - \frac{\Delta}{W} \varepsilon_2 \right) + \right. \\
 &\quad \left. + (1 + w_2)^2 \left(\varrho - \frac{\Delta}{W} \varepsilon_1 \right) \right] \mathcal{P}_{N_z-2} + (1 + w_1)^2 (1 + w_2)^2 \mathcal{P}_{N_z-3},
 \end{aligned} \tag{2.38}$$

gde je \mathcal{P}_{N_z} karakteristični Čebiševljev polinom druge vrste [10].

2.3.2 Zakon disperzije

Uslov (2.37), u opštem slučaju, može da se reši numerički za zadate parametre $\varepsilon_{1/2}, w_{1/2}$ i N_z [10,13], ali i analitički kada je: $\varepsilon_{1/2} = w_{1/2} = 0$.

Drugi pomenuti slučaj odgovara film-strukturi „isečenoj“ iz beskonačne [11,12]. Tada je:

$$\mathcal{D}_{N_z+1}(\varrho) = \mathcal{P}_{N_z+1}(\zeta) = \frac{\sin(N_z + 2)\zeta}{\sin \zeta}; \quad \varrho = 2 \cos \zeta. \tag{2.39}$$

Iz uslova (2.37), tj. za $\mathcal{P}_{N_z+1} \equiv 0$, dobija se: $\zeta_\mu = \frac{\pi \mu}{N_z + 2}$; $\mu = 1, 2, 3, \dots, N_z + 1$. Na osnovu ovoga i jednačine (2.36) sledi:

$$\hbar \omega_\mu = \Delta - 2W (\cos ak_x + \cos ak_y - \cos \zeta_\mu), \quad (2.40)$$

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

$$k_z(\nu) = \frac{\pi}{a} \frac{\nu}{N_z + 2}; \quad \nu = 1, 2, 3, \dots, N_z + 1. \quad (2.41)$$

Zamenom ovih relacija u (2.38) i uzimajući u obzir da je $E_{\vec{k}}(\nu) = \hbar\omega_\nu$ i $\Delta = 6W$, sledi:

$$\mathcal{E}_{\vec{k}}(\nu) \equiv \mathcal{F}_{k_x k_y} + \mathcal{G}_{k_z}(\nu), \quad (2.42)$$

$$\mathcal{E}_{\vec{k}}(\nu) \equiv \frac{E_{\vec{k}}(\nu)}{4W}; \quad \mathcal{F}_{k_x k_y} = \sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y}{2}; \quad \mathcal{G}_{k_z}(\nu) = \sin^2 \frac{ak_z(\nu)}{2}.$$

Izraz (2.42) predstavlja zakon disperzije slabo vezanih elektrona u filmu i ima istu formu kao izraz (2.30) dođen za idealne neograničene strukture, s razlikom što je tamo k_z praktično kontinualno promenljivo (u intervalu $[0, \pi/a]$)⁹ kao što su k_x i k_y , a ovde je diskretno - dato izrazom (2.41).

Pored toga, uočava se da je:

$$k_x^{min} = k_y^{min} = 0; \quad k_z^{min} = \frac{\pi}{a} \frac{1}{N_z + 2} > 0, \quad (2.43)$$

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

$$k_x^{max} = k_y^{max} = \frac{\pi}{a}; \quad k_z^{max} = \frac{\pi}{a} \frac{N_z + 1}{N_z + 2} < \frac{\pi}{a}. \quad (2.44)$$

Između 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, dolazi se do zaključka da elektronski spektar u tankom filmu poseduje dva energetska gepa, donji g i gornji h :

$$g \equiv \mathcal{E}_f^{min} - \mathcal{E}_b^{min} = \frac{1}{4} \left(\frac{\pi}{N_z + 2} \right)^2 = \mathcal{E}_b^{max} - \mathcal{E}_f^{max} \equiv h \quad (2.45)$$

(indeks f označava film, a b beskonačnu strukturu). Vidi se da veličine gepova naglo opadaju sa debljinom filma (kvadratna zavisnost). To znači da je njihova praktična egzistencija vezana samo za ultratanke (nano) strukture [2,10-12].

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

$$\Delta \mathcal{E} \equiv (\Delta \mathcal{E}_f) = (\Delta \mathcal{E}_b) - (g + h) = 1 - \frac{1}{2} \left(\frac{\pi}{N_z + 2} \right)^2. \quad (2.46)$$

Vidi se da se širina energetske zone elektrona kristalnog filma veoma brzo (parabolički) približava balkovskoj vrednosti, kada se debljina filma povećava (kada raste N_z).

Rezultati numeričke analize [10,13] pokazali su da za neke vrednosti energetskih parametara¹⁰ spektar mogućih energetskih podnivoa može da „napusti” balkovske granice, kada se javljaju tzv. lokalizovana energetska stanja elektrona.

⁹ Posmatramo samo „desnu” polovinu spektra ($k_j \geq 0$, $j = x, y, z$) znajući da je on ogledalski simetričan.

¹⁰ Povećanjem parametara $\varepsilon_{1/2}$ ceo spektar se pomera ka višim vrednostima energija, pa čak može da izadje van najviše balkovske granice. Povećanjem parametara $w_{1/2}$ energetski spektar se širi, prema ili van granica energetske zone idealnog kristala.

3 Elektroni u superrešetkama

Poslednjih godina sve širu primenu u nanoelektronici i optoelektronici nalaze višeslojne poluprovodničke nanostrukture (nanometarskih karakterističnih dimenzija), tzv. superrešetke, kvantne žice, kvantne tačke. Razvoj moderne tehnike kristalnog rasta, kao što su epitaksija molekulskim snopom i naparavanje iz metal organskih jedinjenja [2,4] izazvao je mogućnost izrade ovakvih struktura.

Poseban interes za proučavanje superrešetki pojavio se nakon otkrića da su visokotemperaturski keramički superprovodnici izrazito slojevite strukture u kojima je dominantna pojava periodični raspored CuO_2 ravni [1,5]. Efekti na kvantnom nivou modifikuju kvazidvodimenzionu strukturu kristalnog filma [1,2,4] u 3D neograničenu strukturu superrešetke.

Superrešetke su veštački formirane strukture, periodične u jednom pravcu, sa periodom koji dvadesetak puta prevaziđa konstantu kristalne rešetke. Postoje dva osnovna tipa superrešetke: dopirane i kompozicione.

Dopirane superrešetke dobijaju se periodičnim naizmeničnim dopiranjem poluprovodničkog materijala akceptorskim i donorskim primesama. Usled toga dolazi do krivljenja energetskih zona i formiranja jednodimenzionog periodičnog potencijala. Kompozicione superrešetke dobijaju se naizmeničnom izradom tankih monokristalnih slojeva dve vrste poluprovodničkih materijala.

U odnosu na kompozicione dopirane superrešetke poseduju prednost, jer ne zahtevaju usaglašenost rešetkih konstanti. Pored toga one poseduju još jednu inteteresantnu osobinu: indirektni energetski procepi u realnom prostoru (elektroni i šupljine su prostorno razdvojeni). Iz tehnoloških razloga kod ovih superrešetki ne mogu se ostvariti periodi manji od nekoliko desetina nanometara, dok je to kod kompozicionih moguće. Da bi se dobole dovoljno duboke jame potrebno je izvršiti dopiranje vrlo visokom koncentracijom primesa. Kod kompozicionih superrešetki jame se ostvaruju diskontinuitetima provodne (valentne zone), a potrebno dopiranje je znatno manje. Zbog toga se kompozicione superrešetke češće primenjuju od dopiranih.

Kod superrešetke, pored trodimenzijske zavisnosti potencijalne energije koja se intezivno menja u okviru konstante rešetke, postoji dodatna periodična jednodimenziona zavisnost potencijalne energije koja se vrlo sporo menja na domenu konstante rešetke. Ova dodatna sporo promenljiva zavisnost je uzrok da se dno (vrh) provodne (valentne) zone cepa na niz dozvoljenih podzona [1,2,4]. Ovako drastično odstupanje strukture provodne (valentne) zone od balkovske uzrok je da se i makroskopski parametri superrešetki bitno razlikuju od balkovskih. Sporo-promenljiva zavisnost potencijalne energije kod superrešetke se može relativno jednostavno menjati, na primer promenom debljine polaznih materijala, a samim tim i makroskopske osobine. Na ovaj način superrešetke predstavljaju nove materijale, čije se osobine, bar u principu, mogu podešavati u željenom opsegu. Ovo je osnovni razlog proučavanja superrešetki (a i ostalih nanostruktura).

Superrešetke se danas primenjuju za izradu:

- poluprovodničkih laserskih dioda i lasera,
- detektora infracrvenog zračenja,
- tranzistora sa efektom polja.

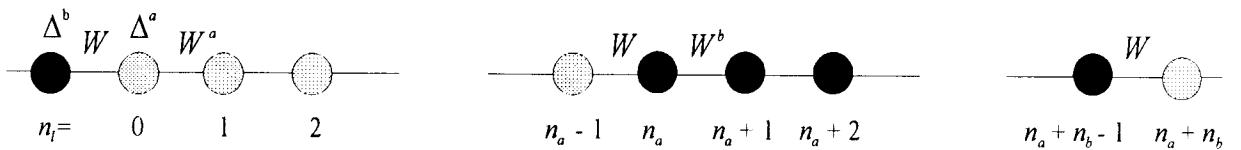
Potencijalne primene ovih struktura koje se mogu uskoro očekivati su:

- infracrveni detektori na bazi unutarzonskih prelaza,
- izvori mikrotalasnog zračenja,
- diode sa rezonantnim tunelovanjem,
- unipolarni poluprovodnički laseri (sa unutarzonskim prelazima),
- elektrooptički modulatori [1,2].

3.1 Model superrešetke

Ultratanke slojevite strukture tipa $(AC)_m(BC)_n$, koje sadrže naizmenično m slojeva dvokomponentnog jedinjenja AC i n slojeva jedinjenja BC , duž specifičnog pravca rasta, su tipičan primer superrešetki [3].

U ovom radu posmatrana je kristalna superrešetka formirana od naizmenično rasporedjenih n_a slojeva jedne i n_b slojeva druge vrste atoma duž Z pravca, koja je duž X i Y pravaca neograničena [14] (na slici 3.1 prikazan je raspored atoma superrešetke duž Z -pravca). Da bi bio moguć spoj slojeva sačinjenih od različitih atoma moraju konstante rešetke duž X i Y pravaca, respektivno, biti jednake, tj. $a_x^a = a_x^b = a_x$ i $a_y^a = a_y^b = a_y$, dok duž Z pravca mogu biti različite ($a_z^a = a^a \neq a_z^b = a^b$ i $a_z^{a-b} = a$).



Slika 3.1: Raspored atoma u superrešetki

Analizu elektronskog podsistema superrešetke započinjemo standardnim hamiltonijanom modelne strukture koji u aproksimaciji najbližih suseda ima oblik [14]:

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{m_{x/y/z}=-N_{x/y/z}/2}^{N_{x/y/z}/2} \left[\sum_{m_l=0}^{n_a-1} \Delta^a a_{m_x m_y m_z m_l}^+ a_{m_x m_y m_z m_l} + \right. \\
 & + \sum_{m_l=n_a}^{n_a+n_b-1} \Delta^b a_{m_x m_y m_z m_l}^+ a_{m_x m_y m_z m_l} - \\
 & - \sum_{m_l=1}^{n_a-2} W^a a_{m_x m_y m_z m_l}^+ (a_{m_x m_y m_z m_l-1} + a_{m_x m_y m_z m_l+1}) - \\
 & - \sum_{m_l=n_a+1}^{n_a+n_b-2} W^b a_{m_x m_y m_z m_l}^+ (a_{m_x m_y m_z m_l-1} + a_{m_x m_y m_z m_l+1}) - \\
 & - a_{m_x m_y m_z, 0}^+ (W a_{m_x m_y m_z-1, n_a+n_b-1} + W^a a_{m_x m_y m_z, 1}) - \\
 & - a_{m_x m_y m_z, n_a-1}^+ (W^a a_{m_x m_y m_z, n_a-2} + W a_{m_x m_y m_z, n_a}) - \\
 & - a_{m_x m_y m_z, n_a}^+ (W a_{m_x m_y m_z, n_a-1} + W^b a_{m_x m_y m_z, n_a+1}) - \\
 & - a_{m_x m_y m_z, n_a+n_b-1}^+ (W^b a_{m_x m_y m_z, n_a+n_b-2} + W a_{m_x m_y m_z+1, 0}) - \\
 & - W_x^{a/b} a_{m_x m_y m_z m_l}^+ (a_{m_x-1, m_y m_z m_l} + a_{m_x+1, m_y m_z m_l}) - \\
 & \left. - W_y^{a/b} a_{m_x m_y m_z m_l}^+ (a_{m_x m_y-1, m_z m_l} + a_{m_x m_y+1, m_z m_l}) \right], \quad (3.1)
 \end{aligned}$$

gde su $\Delta^{a/b}$ energije elektrona lokalizovanih na kristalnim čvorovima, dok su $W_x^{a/b}$, $W_y^{a/b}$ i $W^{a/b}$ energije elektronskog transfera izmedju istih atoma duž X , Y i Z pravaca respektivno; W je energija elektronskog transfera izmedju različitih atoma duž Z pravca; $m_{x/y}$ brojač atomskog

čvora po X , tj. Y pravcu; m_z brojač položaja početka osnovnog lanca superrešetke (duž Z pravca), a $m_l \in [0, n_a + n_b - 1]$ je brojač položaja čvora u osnovnom lancu. Zbog pogodnosti, hamiltonijan iz gornje relacije pisaćemo u obliku zbiru:

$$H = H_1 + H_2 - \sum_{\nu=3}^{10} H_\nu \quad (3.2)$$

Pri čemu je:

$$\begin{aligned} H_1 &= \sum_{m_x/y/z=-N_x/y/z/2}^{N_x/y/z/2} \sum_{m_l=0}^{n_a-1} \Delta^a a_{m_x m_y m_z m_l}^+ a_{m_x m_y m_z m_l}, \\ H_2 &= \sum_{m_x/y/z=-N_x/y/z/2}^{N_x/y/z/2} \sum_{m_l=n_a}^{n_a+n_b-1} \Delta^b a_{m_x m_y m_z m_l}^+ a_{m_x m_y m_z m_l}, \\ H_3 &= \sum_{m_x/y/z=-N_x/y/z/2}^{N_x/y/z/2} \sum_{m_l=1}^{n_a-2} W^a a_{m_x m_y m_z m_l}^+ (a_{m_x m_y m_z m_l-1} + a_{m_x m_y m_z m_l+1}), \\ H_4 &= \sum_{m_x/y/z=-N_x/y/z/2}^{N_x/y/z/2} \sum_{m_l=n_a+1}^{n_a+n_b-2} W^b a_{m_x m_y m_z m_l}^+ (a_{m_x m_y m_z m_l-1} + a_{m_x m_y m_z m_l+1}), \\ H_5 &= \sum_{m_x/y/z=-N_x/y/z/2}^{N_x/y/z/2} a_{m_x m_y m_z, 0}^+ (W a_{m_x m_y m_z-1, n_a+n_b-1} + W^a a_{m_x m_y m_z, 1}), \\ H_6 &= \sum_{m_x/y/z=-N_x/y/z/2}^{N_x/y/z/2} a_{m_x m_y m_z, n_a-1}^+ (W^a a_{m_x m_y m_z, n_a-2} + W a_{m_x m_y m_z, n_a}), \\ H_7 &= \sum_{m_x/y/z=-N_x/y/z/2}^{N_x/y/z/2} a_{m_x m_y m_z, n_a}^+ (W a_{m_x m_y m_z, n_a-1} + W^b a_{m_x m_y m_z, n_a+1}), \\ H_8 &= \sum_{m_x/y/z=-N_x/y/z/2}^{N_x/y/z/2} a_{m_x m_y m_z, n_a+n_b-1}^+ (W^b a_{m_x m_y m_z, n_a+n_b-2} + W a_{m_x m_y m_z+1, 0}), \\ H_9 &= \sum_{m_x/y/z=-N_x/y/z/2}^{N_x/y/z/2} W_x^{a/b} a_{m_x m_y m_z m_l}^+ (a_{m_x-1, m_y m_z m_l} + a_{m_x+1, m_y m_z m_l}), \\ H_{10} &= \sum_{m_x/y/z=-N_x/y/z/2}^{N_x/y/z/2} W_y^{a/b} a_{m_x m_y m_z m_l}^+ (a_{m_x m_y-1, m_z m_l} + a_{m_x m_y+1, m_z m_l}). \end{aligned}$$

Za proizvoljnu funkciju položaja važe uslovi cikličnosti po x i y indeksima pomoću kojih se dobijaju dozvoljene vrednosti x i y komponente talasnog vektora:

$$f_{m_x m_y m_z m_l + N_{x/y}} = f_{m_x m_y m_z m_l}, \quad (3.3)$$

na osnovu čega sledi:

$$e^{i N_{x/y} k_x / y^{a/x} x / y} = e^{2\pi \nu_{x/y} i}. \quad (3.4)$$

Na analogan način se može napisati i ciklični uslov po z koordinati:

$$f_{m_x m_y m_z m_l + (n_a + n_b) N_z} = f_{m_x m_y m_z m_l}, \quad (3.5)$$

odakle se dobija:

$$e^{i(n_a+n_b)N_z k_z \tilde{a}} = e^{2\pi\nu_z i}. \quad (3.6)$$

Prebrojavanje dozvoljenih vrednosti z komponente talasnog vektora, tj. k_z vrši se brojačem $\nu_z \in 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm N_z/2$ čime se definišu granice I Briluenove zone duž Z pravca.

$$k_z \in \left[-\frac{\pi}{(n_a + n_b)\tilde{a}}, +\frac{\pi}{(n_a + n_b)\tilde{a}} \right], \quad (3.7)$$

gde je uvedena oznaka \tilde{a} za srednju vrednost konstante rešetke duž Z pravca:

$$\tilde{a} = \frac{(n_a - 1)a^a + (n_b - 1)a^b + 2a}{n_a + n_b}. \quad (3.8)$$

3.2 Jednačine kretanja

Zakon disperzije elektrona može se naći standardnim metodom Grinovih funkcija [9]. Računa se jednočestična antikomutatorska Grinova funkcija pomoću predhodno definisanog Hamiltonijana sistema:

$$G_{n_x n_y n_z n_l; m_x m_y m_z m_l} = \Theta(t) \langle \{a_{n_x n_y n_z n_l}, a_{m_x m_y m_z m_l}^+\} \rangle. \quad (3.9)$$

U daljem tekstu uzima se da je $\vec{n} \equiv (n_x n_y n_z n_l)$ i $\vec{m} \equiv (m_x m_y m_z m_l)$. Jednačina kretanja za Grinovu funkciju je:

$$i\hbar \frac{d}{dt} G_{\vec{n}; \vec{m}}(t) = i\hbar \delta(t) \delta_{\vec{n}; \vec{m}} + \Theta(t) \langle \{[a_{\vec{n}}(t), H], a_{\vec{m}}^+(0)\} \rangle. \quad (3.10)$$

Drugi deo izraza na desnoj strani jednačine kretanja (3.10) označićemo kao:

$$\Theta(t) \langle \{[a_{\vec{n}}, H], a_{\vec{m}}^+\} \rangle = F, \quad (3.11)$$

a komutator:

$$\hat{C} \equiv \hat{C}_{\vec{n}} \equiv [a_{\vec{n}}, H] = \hat{C}_1 + C_2 - \sum_{\nu=3}^{10} \hat{C}_\nu, \quad (3.12)$$

na osnovu čega dobijamo:

$$F \equiv F_{\vec{n}; \vec{m}} \equiv \Theta(t) \langle \{\hat{C}, a_{\vec{m}}^+\} \rangle = F_1 + F_2 - \sum_{\nu=3}^{10} F_\nu. \quad (3.13)$$

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

$$\{a_{\vec{n}}, a_{\vec{m}}^+\} = \delta_{\vec{n}; \vec{m}}, \quad \{a_{\vec{n}}, a_{\vec{m}}\} = \{a_{\vec{n}}^+, a_{\vec{m}}^+\} = 0. \quad (3.14)$$

Dalje se vrši računanje komutatora \hat{C}_ν :

$$\begin{aligned} \hat{C}_1 &= [a_{\vec{n}}, H_1] = \Delta^a \sum_{\vec{m}} [a_{\vec{m}}, a_{\vec{m}}^+ a_{\vec{m}}] = \\ &= \Delta \sum_{\vec{m}} [a_{\vec{m}}^+ (a_{\vec{n}}, a_{\vec{m}} - a_{\vec{m}} a_{\vec{n}}) + (a_{\vec{n}} a_{\vec{m}}^+ - a_{\vec{m}}^+ a_{\vec{n}}) a_{\vec{m}}]. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Iz relacije (3.14) sledi da je: $a_{n_x n_y n_z n_l} a_{m_x m_y m_z m_l} = -a_{m_x m_y m_z m_l} a_{n_x n_y n_z n_l}$, odnosno $a_{m_x m_y m_z m_l}^+ a_{n_x n_y n_z n_l} = \delta_{n_x m_x} \delta_{n_y m_y} \delta_{n_z m_z} \delta_{n_l m_l} - a_{n_x n_y n_z n_l} a_{m_x m_y m_z m_l}^+$, pa je:

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

Poznato je da $\delta_{n_x n_y n_z n_l; m_x m_y m_z m_l}$ „skida“ sumu po m_x, m_y, m_z, m_l i svako $m_j \rightarrow n_j$, ($j = x, y, z, l$), te se konačno dobija: $\hat{C}_1 = \Delta^a a_{n_x n_y n_z n_l}$. Analognim računom za ostale vrednosti komutatora \hat{C}_ν se dobija:

$$\begin{aligned}\hat{C}_2 &= \Delta^b a_{n_x n_y n_z n_l}, \quad \hat{C}_3 = W^a (a_{n_x n_y n_z n_l-1} + a_{n_x n_y n_z n_l+1}), \\ \hat{C}_4 &= W^b (a_{n_x n_y n_z n_l-1} + a_{n_x n_y n_z n_l+1}), \\ \hat{C}_5 &= W a_{n_x n_y n_z-1, n_a+n_b+1} \delta_{n_l, 0} + W^a a_{n_x n_y n_z, 1} \delta_{n_l, 0}, \\ \hat{C}_6 &= W^a a_{n_x n_y n_z, n_a-2} \delta_{n_l, n_a-1} + W a_{n_x n_y n_z n_a} \delta_{n_l, n_a-1}, \\ \hat{C}_7 &= W a_{n_x n_y n_z, n_a-1} \delta_{n_l, n_a} + W^b a_{n_x n_y n_z, n_a+1} \delta_{n_l, n_a}, \\ \hat{C}_8 &= W^b a_{n_x n_y n_z, n_a+n_b-2} \delta_{n_l, n_a+n_b-1} + W a_{n_x n_y n_z+1, 0} \delta_{n_l, n_a+n_b-1}, \\ \hat{C}_9 &= W_x^{a/b} (a_{n_x-1, n_y n_z n_l} + a_{n_x+1, n_y n_z n_l}) \delta_{n_l, m_l}, \\ \hat{C}_{10} &= W_y^{a/b} (a_{n_x n_y-1, n_z n_l} + a_{n_x n_y+1, n_z n_l}) \delta_{n_l, m_l}.\end{aligned}$$

Pomoću izračunatih komutatora mogu se napisati izrazi za svako F_ν iz jednačine (3.11)

$$F_1 = \Theta(t) \langle \hat{C}_1, a_{m_x m_y m_z m_l}^+ \rangle = \Delta^a \Theta(t) \langle a_{n_x n_y n_z n_l}, a_{m_x m_y m_z m_l}^+ \rangle = \Delta^a G_{n_x n_y n_z n_l; \vec{m}}(t).$$

Analogno se dobijaju i ostale vrednosti za F_ν :

$$\begin{aligned}F_2 &= \Delta^b G_{n_x n_y n_z n_l; \vec{m}}(t), \\ F_3 &= W^a G_{n_x n_y n_z n_l-1; \vec{m}}(t) + W^a G_{n_x n_y n_z n_l+1; \vec{m}}(t), \\ F_4 &= W^b G_{n_x n_y n_z n_l-1; \vec{m}}(t) + W^b G_{n_x n_y n_z n_l+1; \vec{m}}(t), \\ F_5 &= W \delta_{n_l, 0} G_{n_x n_y n_z-1, n_a+n_b-1; \vec{m}}(t) + W^a \delta_{n_l, 0} G_{n_x n_y n_z, 1; \vec{m}}(t), \\ F_6 &= W \delta_{n_l, n_a-1} G_{n_x n_y n_z, n_a-2; \vec{m}}(t) + W \delta_{n_l, n_a-1} G_{n_x n_y n_z, n_a; \vec{m}}(t), \\ F_7 &= W \delta_{n_l, n_a} G_{n_x n_y n_z, n_a-1; \vec{m}}(t) + W^b \delta_{n_l, n_a} G_{n_x n_y n_z, n_a+1; \vec{m}}(t), \\ F_8 &= W^b \delta_{n_l, n_a+n_b-1} G_{n_x n_y n_z, n_a+n_b-2; \vec{m}}(t) + W \delta_{n_l, n_a+n_b-1} G_{n_x n_y n_z+1, 0; \vec{m}}(t), \\ F_9 &= W_x^{a/b} \delta_{n_l, m_l} G_{n_x-1, n_y n_z, n_l; \vec{m}}(t) + W_x^{a/b} \delta_{n_l, m_l} G_{n_x+1, n_y n_z, n_l; \vec{m}}(t), \\ F_{10} &= W_y^{a/b} \delta_{n_l, m_l} G_{n_x, n_y-1, n_z, n_l; \vec{m}}(t) + W_y^{a/b} \delta_{n_l, m_l} G_{n_x, n_y+1, n_z, n_l; \vec{m}}(t).\end{aligned}$$

Zamenom dobijenih vrednosti u jednačinu kretanja za Grinovu funkciju, dobija se:

$$\begin{aligned}i\hbar \frac{d}{dt} G_{\vec{n}, \vec{m}}(t) &= i\hbar \delta_{\vec{n}, \vec{m}} \delta(t) + \Delta_{\vec{n}} G_{\vec{n}, \vec{m}}(t) - W_x^{\vec{n}} \left[G_{n_x+1, n_y n_z; \vec{m}}(t) + G_{n_x-1, n_y n_z; \vec{m}}(t) \right] - \\ &\quad - W_y^{\vec{n}} \left[G_{n_x n_y+1, n_z; \vec{m}}(t) + G_{n_x n_y-1, n_z; \vec{m}}(t) \right] - \\ &\quad - W_{\vec{n}; n_x n_y n_z n_l-1} G_{n_x n_y n_z n_l-1; \vec{m}} - W_{\vec{n}; n_x n_y n_z n_l+1} G_{n_x n_y n_z n_l+1; \vec{m}},\end{aligned} \tag{3.16}$$

gde su uvedene oznake:

$$\begin{aligned}\Delta_{\vec{n}} &= \begin{cases} \Delta^a & 0 \leq n_l \leq n_a - 1 \\ \Delta^b & n_a \leq n_l \leq n_a + n_b - 1 \end{cases} \\ W_{x/y}^{\vec{n}} &= \begin{cases} W_{x/y}^a & 0 \leq n_l \leq n_a - 1 \\ W_{x/y}^b & n_a \leq n_l \leq n_a + n_b - 1 \end{cases} \\ W_{\vec{n};n_x n_y n_z n_l-1} &= \begin{cases} W^a & 1 \leq n_l \leq n_a - 1 \\ W^b & n_a + 1 \leq n_l \leq n_a + n_b - 1 \\ W & n_l = 0, n_l = n_a \end{cases} \\ W_{\vec{n};n_x n_y n_z n_l+1} &= \begin{cases} W^a & 0 \leq n_l \leq n_a - 2 \\ W^b & n_a \leq n_l \leq n_a + n_b - 2 \\ W & n_l = n_a - 1, n_l = n_a + n_b - 1 \end{cases}\end{aligned}\quad (3.17)$$

Nakon izvršene vremenske Furije transformacije:

$$G_{\vec{n}, \vec{m}}(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega t} G_{\vec{n}, \vec{m}}(\omega), \quad \delta(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega t}, \quad (3.18)$$

dobija se jednačina kretanja u sledećem obliku:

$$\begin{aligned}\hbar\omega G_{\vec{n}, \vec{m}} &= \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{\vec{n}, \vec{m}} + \Delta_{\vec{n}} G_{\vec{n}, \vec{m}} - \\ &- W_x^{\vec{n}} (G_{n_x-1, n_y n_z n_l; \vec{m}} + G_{n_x+1, n_y n_z n_l; \vec{m}}) - W_y^{\vec{n}} (G_{n_x n_y-1, n_z n_l; \vec{m}} + G_{n_x n_y+1, n_z n_l; \vec{m}}) - \\ &- W_{\vec{n};n_x n_y n_z n_l-1} G_{n_x n_y n_z n_l-1; \vec{m}} W_{\vec{n};n_x n_y n_z n_l+1} G_{n_x n_y n_z n_l+1; \vec{m}}.\end{aligned}\quad (3.19)$$

Zbog narušenja translacione invarijantnosti posmatranog sistema uvodi se delimična prostorna Furije transformacija po indeksima x, y i z (jer je po indeksu l translaciona simetrija narušena)

$$f_{\vec{n}, \vec{m}} = \frac{1}{N_x N_y N_z} \sum_{k_x k_y k_z} f_{n_l; m_l} e^{i[a_x k_x (n_x - m_x) + a_y k_y (n_y - m_y) + \tilde{a}(n_a + n_b) k_z (n_z - m_z) + J]}, \quad (3.20)$$

gde je:

$$J = \begin{cases} 1. a^a k_z (n_l - m_l) & , n_l - m_l < n_a \\ 2. a^a k_z (n_a - 1) + a k_z & , n_l - m_l = n_a \\ 3. a^a k_z (n_a - 1) + a k_z + a^b k_z (n_l - m_l - n_a) & , n_a < n_l - m_l < n_a + n_b \\ 4. a^a k_z (n_a - 1) + a^b k_z (n_b - 1) + 2 a k_z & , n_l - m_l = n_a + n_b \end{cases} \quad (3.21)$$

Tako za $n_l = 0$ jednačina kretanja, nakon izvršenih transformacija postaje:

$$\begin{aligned}&\frac{1}{N_x N_y N_z} \sum_{k_x k_y k_z} e^{i[a_x k_x (n_x - m_x) + a_y k_y (n_y - m_y) + \tilde{a}(n_a + n_b) k_z (n_z - m_z)]} \times \\ &\times \left\{ [\hbar\omega - \Delta^a + W_x^a (e^{ia_x k_x} + e^{-ia_x k_x}) + W_y^a (e^{ia_y k_y} + e^{-ia_y k_y})] G_{0; m_l} + \right. \\ &+ W e^{ik_z [-(n_a - 1)a^a - (n_b - 1)a^b - 2a + a^a(n_a - 1) + a + a^b(n_b - 1)]} G_{n_a + n_b - 1; m_l} + \\ &\left. + W^a e^{ia^a k_z} G_{1; m_l} - \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{0, m_l} \right\} = 0,\end{aligned}\quad (3.22)$$

odnosno (indeks m je „parazitski” pa se može izostaviti):

$$\begin{aligned} [\hbar\omega - \Delta^a + 2W_x^a \cos a_x k_x + 2W_y^a \cos a_y k_y] G_0 \\ + W e^{-iak_z} G_{n_a+n_b-1} + W^a e^{ia^a k_z} G_1 = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_0 . \end{aligned} \quad (3.23)$$

Ponavljujući isti postupak izračunavanja za svaki sloj, dobija se sistem od $n_a + n_b$ nehomogenih algebarsko-diferencnih jednačina, sa isto toliko nepoznatih Grinovih funkcija:

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - \Delta^a + 2(W_x^a \cos a_x k_x + W_y^a \cos a_y k_y)] G_0 + \\ & + W G_{n_a+n_b-1} e^{-iak_z} + W^a G_1 e^{ia^a k_z} = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_0 \\ & [\hbar\omega - \Delta^a + 2(W_x^a \cos a_x k_x + W_y^a \cos a_y k_y)] G_1 + \\ & + W^a (G_0 e^{-ia^a k_z} + G_2 e^{ia^a k_z}) = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_1 \\ & * \\ & * \\ & * \\ & [\hbar\omega - \Delta^a + 2(W_x^a \cos a_x k_x + W_y^a \cos a_y k_y)] G_{n_a-2} + \\ & + W^a (G_{n_a-3} e^{-ia^a k_z} + G_{n_a-1} e^{ia^a k_z}) = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{n_a-2} \\ & [\hbar\omega - \Delta^a + 2(W_x^a \cos a_x k_x + W_y^a \cos a_y k_y)] G_{n_a-1} + \\ & + W^a G_{n_a-2} e^{-ia^a k_z} + W G_{n_a} e^{ia^a k_z} = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{n_a-1} \\ & [\hbar\omega - \Delta^b + 2(W_x^b \cos a_x k_x + W_y^b \cos a_y k_y)] G_{n_a} + \\ & + W G_{n_a-1} e^{-iak_z} + W^b G_{n_a+1} e^{iak_z} = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{n_a} \\ & [\hbar\omega - \Delta^b + 2(W_x^b \cos a_x k_x + W_y^b \cos a_y k_y)] G_{n_a+1} + \\ & + W^b (G_{n_a} e^{-iak_z} + G_{n_a+2} e^{iak_z}) = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{n_a+1} \\ & * \\ & * \\ & * \\ & [\hbar\omega - \Delta^b + 2(W_x^b \cos a_x k_x + W_y^b \cos a_y k_y)] G_{n_a+n_b-2} + \\ & + W^b (G_{n_a+n_b-3} e^{-iak_z} + G_{n_a+n_b-1} e^{iak_z}) = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{n_a+n_b-2} \\ & [\hbar\omega - \Delta^b + 2(W_x^b \cos a_x k_x + W_y^b \cos a_y k_y)] G_{n_a+n_b-1} + \\ & + W^b G_{n_a+n_b-2} e^{-iak_z} + W + G_0 e^{iak_z} = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{n_a+n_b-1} . \end{aligned} \quad (3.24)$$

Kako indeks l prebrojava $n_a + n_b$ neekvivalentnih kristalnih čvorova unutar osnovnog lanca superrešetke, postoji samo $n_a + n_b$ različitih transforma Grinovih funkcija. Stoga je pri pisanju navedenog sistema jednačina iskorišćena relacija:

$$G_{n_x n_y n_z n_l + (n_a + n_b)} = G_{n_x n_y n_z n_l} . \quad (3.25)$$

Uvodeći sledeće smene i pojednostavljenjem modela:

$$\left. \begin{array}{l} a^a = a^b = \tilde{a} = a = a_z \\ a_x^{a/b} = a_y^{a/b} = a_z = a \end{array} \right\} \text{model proste kubne rešetke}$$

$$\begin{aligned} \Delta^a &\equiv \Delta, \quad \Delta^b = \varepsilon \Delta, \\ \frac{W_{x/y}^a}{W} &= \frac{W^a}{W} = \alpha, \quad \frac{W_{x/y}^b}{W} = \frac{W^b}{W} = \beta, \\ F &= 2(\cos ak_x + \cos ak_y) \in [-4, 4], \end{aligned} \quad (3.26)$$

determinanta sistema se može napisati u sledećoj formi:

$$\left[\begin{array}{ccc|ccc|ccc} \rho_\alpha & \alpha e^{iak_z} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e^{-iak_z} \\ \alpha e^{-iak_z} & \rho_\alpha & \alpha e^{iak_z} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \alpha e^{-iak_z} & \rho_\alpha & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ - & - & - & - & - & - & - & - & - \\ 0 & 0 & 0 & \alpha e^{iak_z} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \rho_\alpha & e^{iak_z} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-iak_z} & \rho_\beta & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \beta e^{-iak_z} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ - & - & - & - & - & - & - & - & - \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \rho_\beta & \beta e^{iak_z} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \beta e^{-iak_z} & \rho_\beta & \beta e^{iak_z} & \rho_\beta \\ e^{iak_z} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \beta e^{-iak_z} & \rho_\beta \end{array} \right]_{\mathcal{N}_{II}} \quad (3.27)$$

gde su $\rho_\alpha = \frac{\hbar\omega - \Delta}{W} + \alpha F$, $\rho_\beta = \frac{\hbar\omega - \varepsilon\Delta}{W} + \beta F$ i $\mathcal{N}_{II} = (n_a + n_b) \times (n_a + n_b)$.

Nepoznatih $n_a + n_b$ Grinovih funkcija određuju se formulom

$$G_{m_z} = \frac{D_{m_z}}{D}, \quad (3.28)$$

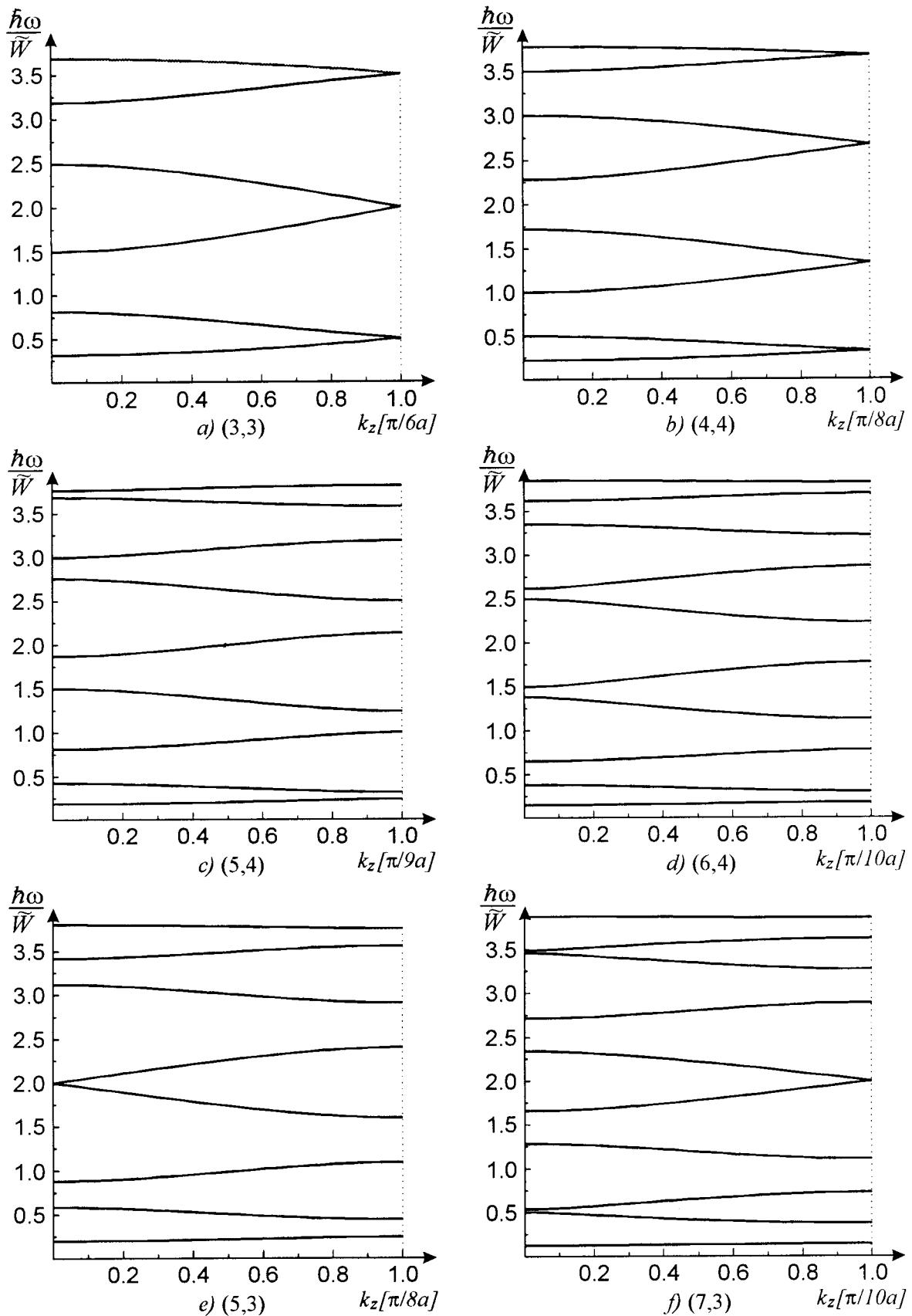
gde je D_{m_z} determinanta promenljive, a D determinanta sistema. Polovi Grinovih funkcija pomoću kojih se određuje zakon disperzije elektrona dobijaju se iz uslova da je determinanta sistema (3.24) jednaka nuli [13].

3.3 Zakon disperzije elektrona

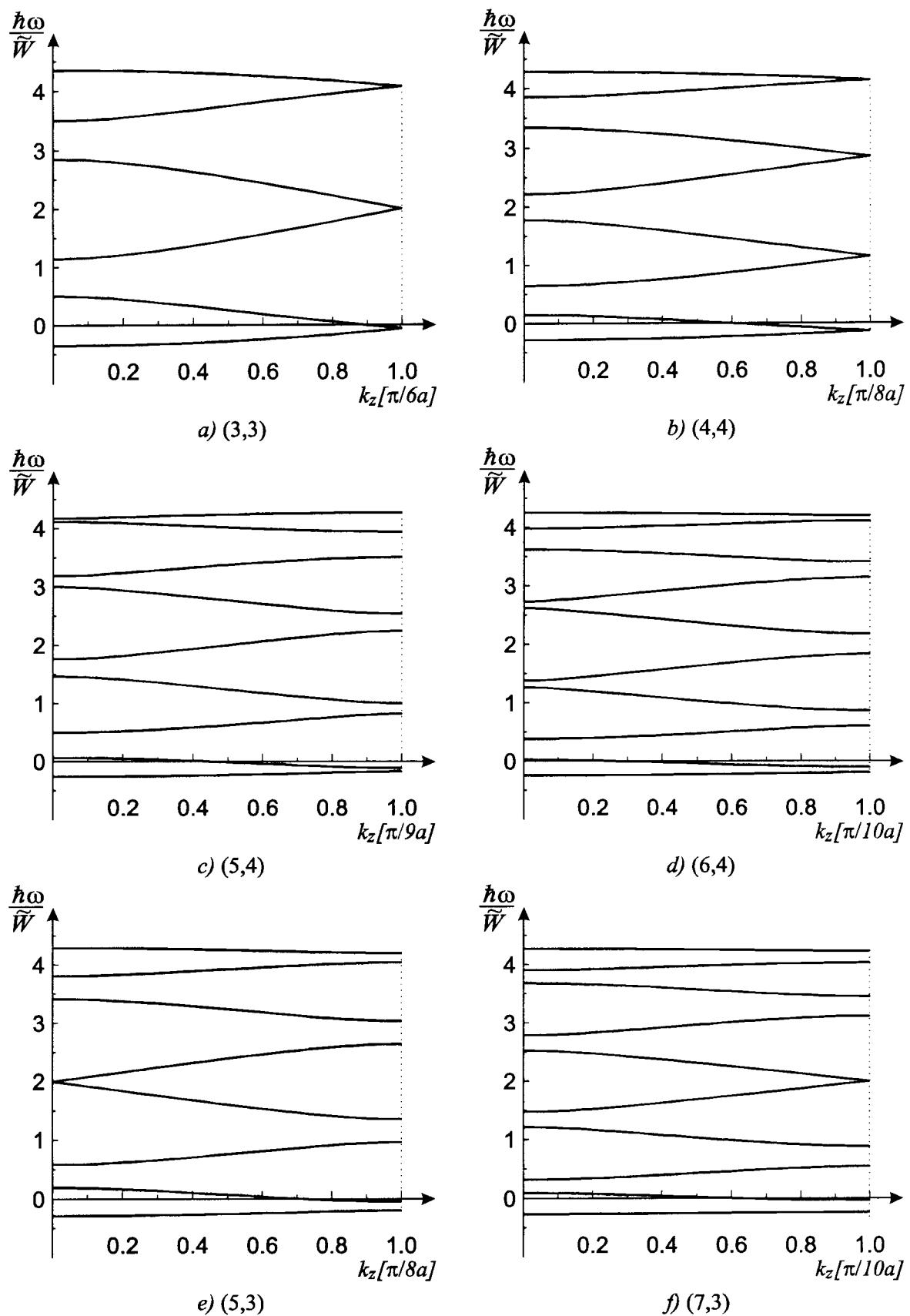
Kako je uslov $D = 0$ analitički nerešiv, ovde su izvršene numeričke analize za neke konkretnе slučajeve. Posmatraju se različite kombinacije n_a i n_b , promena odnosa energije transfera između i unutar filmova, kao i različite vrednosti komponenata talasnih vektora duž x i y pravaca.

Prilikom dalje analize posmatrane su superrešetke izgradjene od filmova (sa n_a odnosno n_b slojeva) istih atoma gde su $\Delta^a = \Delta^b = \Delta$ i $W^a = W^b = \tilde{W}$, dok je energija transfera elektrona između filmova različita od energije transfera unutar filma, tj. $W \neq \tilde{W}$.

Na slikama 3.2a-f i 3.3a-f prikazani su zakoni disperzije elektrona u superrešetkama sa filmovima različitih debljin. Ovde je razmatran samo centar I Briluenove zone gde je $F = 4$, jer je $k_x = k_y = 0$.



Slika 3.2: Zakon disperzije elektrona za $W = 0.5\tilde{W}$
(pojava donjeg i gornjeg energetskog gепа i zabranjenih energetskih zona)



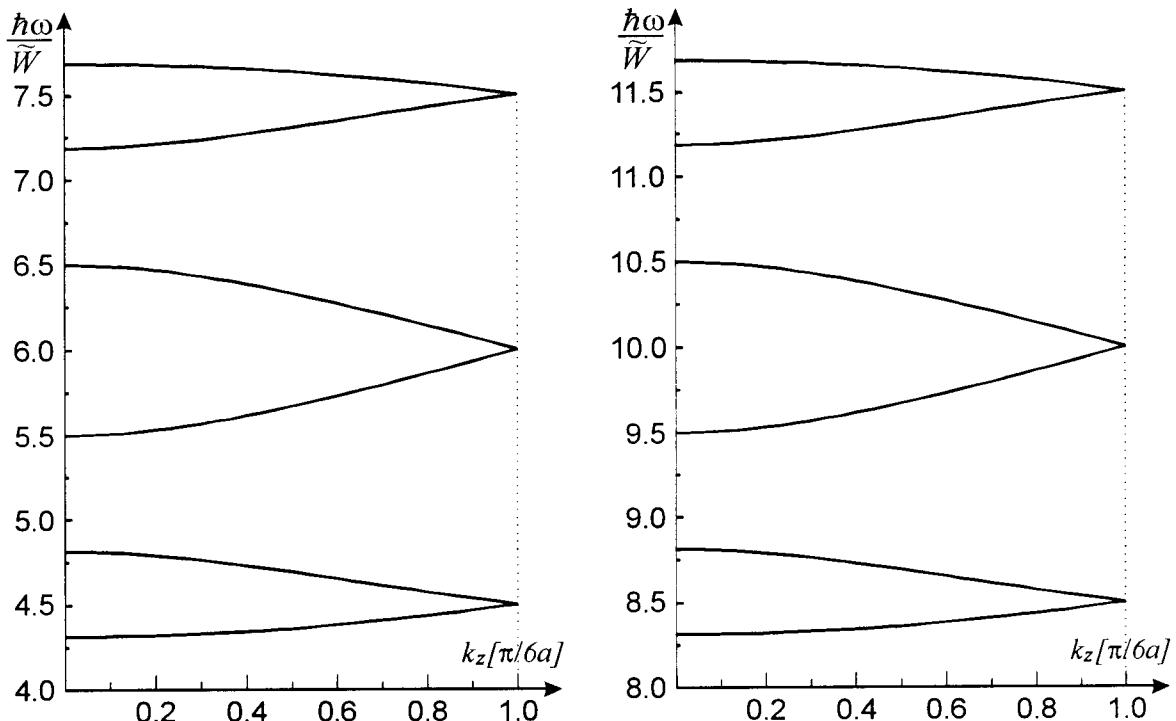
Slika 3.3: Zakon disperzije elektrona za $W = 1.5\tilde{W}$ (pojava lokalizovanih stanja)

Analizom prikazanih grafika uočene su sledeće karakteristike zakona disperzije elektrona u superrešetkama¹¹.

- U slučaju kada je transfer elektrona izmedju filmova slabiji od transfera unutar filma (slika 3.2a-f) javljaju se zabranjene energetske zone od kojih se najniža i najviša mogu (po analogiji sa modelom kristalnog filma [11,12]) nazvati donji i gornji energetski gep. Celokupna disperziona kriva leži unutar balkovske energetske zone ($\frac{\hbar\omega}{\tilde{W}} \in [0, 4]$), tj. dolazi do sužavanja energetske zone elektrona u superrešetki. To je direktna posledica smanjenja energije elektronskog transfera (što je pokazano u slučaju kristalnog filma [13]).
- Pri intenzivnijem transferu elektrona izmedju filmova ($W > \tilde{W}$) dolazi do širenja energetske zone ([13]) van balkovskih granica i do pojave lokalizovanih stanja (slika 3.2a-f). Za razliku od modela kristalnog filma [11-13] gde se javljaju diskretna stanja, kod superrešetke egzistiraju kvazikontinualne disperzione podgrane lokalizovanih stanja (ispod donje i iznad gornje granice balkovske energetske zone), što je posledica neograničenosti sistema i duž Z pravca. Takodje je uočena pojava zabranjenih energetskih zona.
- U slučaju simetrične superrešetke ($n_a = n_b$ sa istim atomima $a = b$, slike 3.2a/b i 3.3a/b) disperzione podgrane se medjusobno spajaju na granici I Briluenove zone ($k_z = \frac{\pi}{2n_a a}$), tj. promenom samo elektronskog transfera izmedju identičnih kristalnih filmova ne dolazi do pojave zabranjenih zona na granici prve Briluenove zone ($k_z^{max} = \frac{\pi}{(n_a + n_b)\tilde{a}}$). Osnovni motiv koji se ponavlja periodično duž z pravca nije više dvostruki film dužine $n_a + n_b = 2n_a$, jer su filmovi medjusobno jednaki. Konstanta periodičnosti duž z pravca je duplo kraća u odnosu na opšti slučaj ($\frac{n_a + n_b}{2} = n_a$). Redefinisanjem granice prve Briluenove zone superrešetke ($k_z^{r;max} = \frac{\pi}{n_a \tilde{a}}$), grafički prikaz zakona disperzije bi pokazao da se zabranjene zone javljaju za $k_z = 0$ kao i za $k_z = k_z^{r;max}$, dok bi broj disperzionih grana bio duplo manji.
- Ukoliko je zbir slojeva filmova $n_a + n_b$ neparan (slike 3.2c i 3.3c) dolazi do pojave simetrije disperzionih grana u odnosu na tačku ($k_z = \frac{\pi}{2a(n_a + n_b)}, \frac{\hbar\omega}{\tilde{W}} = 2$), a ukoliko je paran (slike 3.2a,b,d-f i 3.3a,b,d-f) javlja se simetrija u odnosu na pravu $\frac{\hbar\omega}{\tilde{W}} = 2$.
- Za superrešetku sa neparnim brojevima n_a i n_b dobija se spajanje centralnih disperzionih grana u tački ($k_z = 0, \frac{\hbar\omega}{\tilde{W}} = 2$) ukoliko je $\frac{n_a + n_b}{2}$ parno (slike 3.2e i 3.3e), odnosno spajanje u tački ($k_z = \frac{\pi}{a(n_a + n_b)}, \frac{\hbar\omega}{\tilde{W}} = 2$) ako je $\frac{n_a + n_b}{2}$ neparno (slike 3.2a,f 3.3a,f). Kod superrešetke sa parnim brojevima n_a i n_b , pri čemu je $n_a \neq n_b$ ne dolazi do spajanja disperzionih grana kako u centru tako ni na granicama prve Briluenove zone.

¹¹Pored prikazanih ispitani su još neki slučajevi radi egzaktnije analize.

Analizom zakona disperzije za $k_x = k_y > 0$ nije uočena promena forme i medjusobnog položaja disperzionih krivih, već samo translatorno pomeranje spektra ka višim energijama (iako su analize izvršene za veći broj slučajeva grafički je prikazana samo superrešetka $n_a = n_b = 3$). U slučaju $k_x = k_y = \frac{\pi}{2a}$ dobija se $\frac{\hbar\omega}{\tilde{W}} \in [4, 8]$ (slika 3.4a), dok je za $k_x = k_y = \frac{\pi}{a} \frac{\hbar\omega}{\tilde{W}} \in [8, 12]$ (slika 3.4b).



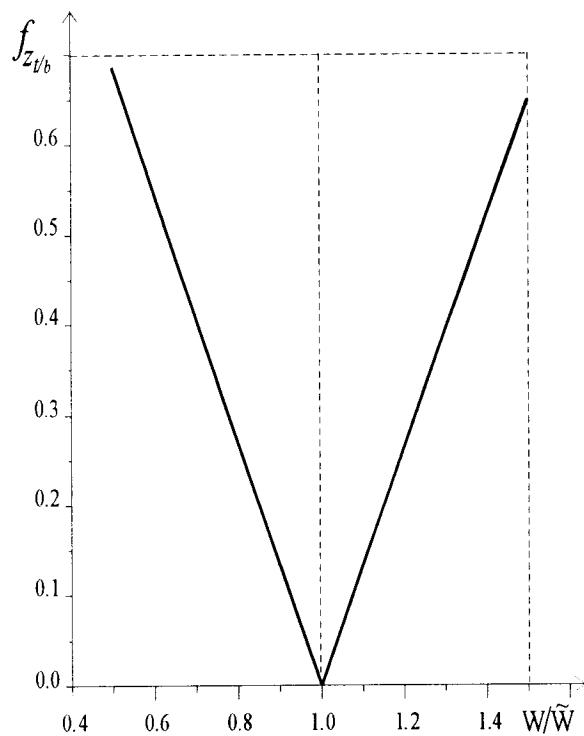
Slika 3.4: Zakon disperzije pri $W = 0.5\tilde{W}$ (a: $k_x = k_y = \frac{\pi}{2a}$, b: $k_x = k_y = \frac{\pi}{a}$)

3.4 Energetski gepovi i zabranjene zone

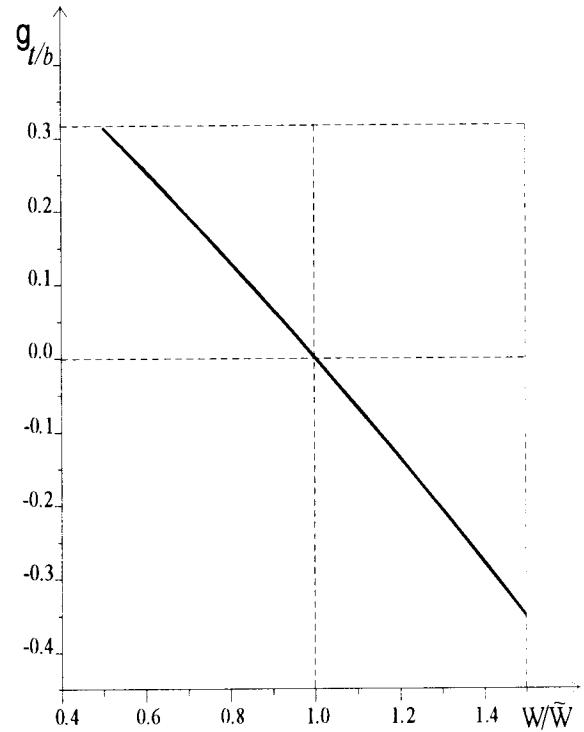
Pojava energetskih gepova i zabranjenih zona analizirana je na najprostijem primeru superrešetke (sastavljena od troslojnih filmova istih atoma). Sledеća tabela 3.1 i slike 3.5 i 3.6 daju zavisnost širina zabranjenih zona i energetskih gepova od odnosa elektronskih transfera W/\tilde{W} :

$\frac{W}{\tilde{W}}$	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.1	1.2	1.3	1.4	1.5
$g_{t/b}$	0.314	0.254	0.193	0.130	0.066	-0.067	-0.136	-0.206	-0.278	-0.351
$f_{z_t/b}$	0.686	0.546	0.407	0.270	0.134	0.133	0.246	0.394	0.522	0.649

Tabela 3.1: Promena širine zabranjenih zona za $k_z = 0$ sa promenom odnosa W/\tilde{W} .



Slika 3.5: Zabranjene energetske zone



Slika 3.6: Energetski gepovi

Sa ovih slika se vidi da, za posmatrani superrešetku, širine zabranjenih zona linearno zavise od odnosa W/\tilde{W} . Može se reći da je i za energetske gepove ta zavisnost praktično linearna.

4 Zaključak

U radu su analizirani energetski spektri elektrona u superrešetkama izgradjenim naizmeničnim ponavljanjem tankih filmova istog materijala. Istraženi su uticaji parametara superrešetke (odnos transfera elektrona i broj slojeva filmova) na energetski spektar elektrona. Na osnovu ovih analiza došlo se do sledećih rezultata.

1. Kao posledica narušenja translacione invarijantnosti duž z -pravca dolazi do cepanja energetske zone (koja je kao i kod neograničenih kristala kontinualna) na podzone razdvojene zabranjenim energetskim zonama.
2. Kako je dužina motiva koji se ponavlja duž z pravca superrešetke veća od medjuatomskih rastojanja, mora se redefinisati z komponenta talasnog vektora elektrona.
3. Pri slabijem transferu elektrona izmedju filmova dolazi do sužavanja energetske zone elektrona i pojave donjeg i gornjeg energetskog gepa. Sve disperzionalne grane se nalaze unutar balkovske energetske zone.
4. Intenzivniji transfer elektrona izmedju filmova dovodi do širenja energetske zone elektrona u superrešetki, van balkovskih granica i pojave lokalizovanih stanja. Disperzionalne grane ovih stanja su kvazikontinualne.
5. U slučaju simetrične superrešetke ($n_a = n_b$) sa istim atomima disperzionalne grane se medju-sobno spajaju na granici prve Briluenove zone. Redefinisanjem granice prve Briluenove zone, ona se povećava dva puta, dok je broj disperzionalnih grana duplo manji.
6. Pri neparnim brojevima n_a i n_b dolazi do spajanja centralnih disperzionalnih grana u tački $k_z = 0$, odnosno $k_z = k_{max}$.
7. Kod superrešetki sa parnim brojevima n_a i n_b ne dolazi do spajanja disperzionalnih grana.
8. Za paran zbir $n_a + n_b$ javlja se osna simetrija disperzionalnih grana u odnosu na sredinu cele energetske zone.
9. Pri neparnom zbiru $n_a + n_b$ dolazi do pojave centralne simetrije disperzionalnih grana.
10. Pri povećanju k_x i k_y dolazi do translatornog pomeranja spektra ka višim energijama, dok se forma zakona disperzije ne menja.
11. Širine zabranjenih energetskih zona i veličine energetskih gepova praktično linearno zavise od odnosa elektronskog transfera W/\tilde{W} .

5 Literatura

1. D.Raković:
FIZIČKE OSNOVE I KARAKTERISTIKE ELEKTROTEHNIČKIH MATERIJALA,
Elektrotehnički fakultet, Beograd 1995.
2. Z.Ikonić i V.Milanović:
POLUPROVODNIČKE KVANTNE MIKROSTRUKTURE,
Univerzitet u Beogradu, Beograd 1997.
3. E.Lazo:
ELECTRONIC STRUCTURE OF A ONE-DIMENSIONAL SUPERLATTICE,
Phys.Stat.Sol.(b) **167**, 95 (1991).
4. M.G.Cottam, D.R.Tilley:
INTRODUCTION TO SURFACE AND SUPERLATTICE EXCITATIONS,
Univ. Press, Cambridge 1989.
5. Ž.A.Spasojević i Z.V.Popović:
ELEKTROTEHNIČKI I ELEKTRONSKI MATERIJALI,
Promezzia, Beograd 1995.
6. I.Supek:
TEORIJSKA FIZIKA I STRUKTURA MATERIJE,
Školska knjiga, Zagreb 1977.
7. C.Kittel:
QUANTUM THEORY OF SOLIDS,
Wiley, New York 1963.
8. B.S.Tošić:
STATISTIČKA FIZIKA,
Institut za fiziku PMF, Novi Sad 1978.
9. G.Rickayzen:
GREEN'S FUNCTIONS AND CONDENSED MATTER,
Academic Press, London 1980.
10. S.M.Stojković:
SPEKTRI I STANJA NOSILACA NAELEKTRISANJA I TRANSPORTNE
KARAKTERISTIKE KVAZIDVODIMENZIONIH SUPERPROVODNIH MATERIJALA
Elektrotehnički fakultet, Beograd 1997.
11. J.P.Šetrajčić, S.Lazarev, S.M.Stojković, S.K.Jačimovski and D.Lj.Mirjanić:
ELECTRON SPECTRA AND STATES OF ULTRATHIN FILMS,
Bul.Stii.Univ. Politehnica Timisoara (Mat.Fiz.) **42**, 50-58 (1997).
12. D.Lj.Mirjanić, S.M.Stojković i J.P.Šetrajčić:
MIKROTEORIJSKI PRILAZ ANALIZI FIZIČKIH VELIČINA
OSOBINA TANKIH SLOJNIH STRUKTURA,
Zbornik radova - 41. ETRAN, 400-403 (1997).
13. J.P.Šetrajčić, S.M.Stojković, B.Abramović and S.Lazarev:
LOCALIZED ELECTRON STATES IN THIN LAYERED STRUCTURES,
3rd BPU, Cluj-Napoca (Romania) 1997.
14. S.M.Stojković, J.P.Šetrajčić, D.Šijačić, I.D.Vragović, D.Lj.Mirjanić i S.B.Lazarev:
ELEKTRONSKA STRUKTURA SUPERREŠETKI,
2. INDEL, Banja Luka 1998.

UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET
KLJUČNA DOKUMENTACIJSKA INFORMACIJA

- Redni broj:
RBR
- Identifikacioni broj:
IBR
- Tip dokumentacije:
Monografska dokumentacija
TD
- Tip zapisa:
Tekstualni štampani materijal
TZ
- Vrsta rada:
Diplomski rad
VR
- Autor:
Iren Junger, br.dos. 96/92
AU
- Mentor:
Dr Jovan Šetrajčić,
redovni profesor, PMF, Novi Sad
MN
- Naslov rada:
Elektronski spektri u superrešetrama
NR
- Jezik publikacije:
Srpski (latinica)
JP
- Jezik izvoda:
Srpski
JI
- Zemlja publikovanja:
Jugoslavija
ZP
- Uže geografsko područje:
Vojvodina
UGP
- Godina:
1998.
GO
- Izdavač:
Autorski reprint
IZ
- Mesto i adresa:
Prirodno-matematički fakultet,
Trg Dositeja Obradovića 4, 21000 Novi Sad
MA
- Fizički opis rada:
(5/30/14/1/7/16/0)
FO
- Naučna oblast:
Fizika
NO
- Naučna disciplina:
Fizika čvrstog stanja
ND
- Predmetna odrednica / ključne reči:
superrešetke, elektroni,
Grinove funkcije,
spektri i stanja
PO
- Čuva se:
Biblioteka Instituta za fiziku,
PMF Novi Sad
- Izvod:
U radu je primjenjen metod dvovremenskih Grinovih funkcija za ispitivanje uticaja granica niza film-struktura (superrešetka) na energetski spektar i moguća stanja elektrona. Nadjeni su izrazi za energetske geopolje elektrona. Dobijeni rezultati predstavljeni su grafički i izvršene su njihove analize. Pored pojave energetskih geopolja u ovim strukturama se uočeno je da se disperziona kriva cepa u nekoliko disperzionih grana razdvajenih zabranjenim zonama.
IZ
- Datum prihvatanja teme od strane Veća:
24.11.1998.
DP
- Datum odbrane:
26.11.1998.
DO
- Članovi komisije:
 - Predsednik:
Dr Ljiljana Mašković,
vanr. profesor, PMF, Novi Sad
 - Članovi:
Dr Jovan Šetrajčić,
red. profesor, PMF, Novi Sad
Dr Jevrem Janjić,
redovni profesor, PMF, Novi SadKO