

ПРИМЉЕНО: 12. VI. 1998	
ОРГАНИЗ.ЈЕД	БРОЈ
0603	9/150

UNIVERZITET U NOVOM SADU  
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET  
INSTITUT ZA FIZIKU

- DIPLOMSKI RAD -

# SIMULACIJA FONONSKIH SPEKTARA U TANKIM KRISTALNIM FILMOVIMA

MENTOR  
PROF. DR JOVAN ŠETRAJČIĆ

KANDIDAT  
ROBERT FIRSTENBERG

NOVI SAD, 1998. godine

*Koristim priliku da se najtoplije zahvalim prof. dr Jovanu Šetrajčiću na pomoći pruženoj tokom izrade ovog rada, kao i na nesebičnoj podršci i znanju koje sam od njega dobio tokom naše, sada već višegodišnje zajedničke saradnje.*

*Takođe, zahvaljujem se i svim profesorima, asistentima i laborantima Instituta za fiziku u Novom Sadu koji su mi omogućili da steknem što više znanja na polju fizike.*

## SADRŽAJ

	Strana
1. Uvod .....	4
2. Mehanička pobuđenja u kristalnim strukturama .....	5
3. Fononi u kristalnim filmovima .....	8
4. Metodi kompjuterske simulacije .....	14
4.1. Osnovi kompjuterske simulacije .....	15
4.2. Podela simulacionih metoda .....	16
5. Simulacija fonona u kristalnim filmovima .....	17
5.1. Simulacija oscilovanja atoma u kristalnoj rešetki .....	17
5.2. Određivanje disperzione relacije za prostorno neograničene kristale .....	19
5.3. Metod Furijeove analize za određivanje fononskog spektra .....	20
5.4. Fononski spektar nehomogenih filmova .....	23
6. Zaključak .....	28
7. Literatura .....	29

## 1. Uvod

Proučavanje oscilovanja atoma u kristalima je od značaja za fiziku čvrstog stanja, s obzirom na činjenicu da se mnoge osobine kristalnih materijala mogu objasniti poznavajući „odziv” atoma kristalne rešetke na mehanička i termalna pobuđenja.

Savremena fizika tretira ova pobuđenja po principima talasno-čestičnog dualizma [1] kao kvazičestice - fonone. Kvant energije elastičnog talasa je fonon. Fononu talasnog vektora  $\vec{k}$  pripisuje se impuls  $\hbar\vec{k}$  i energija  $\hbar\omega(\vec{k})$ .

Od posebnog je interesa poznavanje fononskog spektra, tj. disperzione relacije  $\omega = \omega(\vec{k})$ . Poznavanjem ove relacije, mogu se odrediti mnoge makroskopske veličine kristala [7].

Ovaj rad se bavi određivanjem disperzione relacije za tanke kristalne film-strukture. Pored filma, obrađene su i neograničene kristalne strukture (balk), u cilju poređenja ponašanja fonona u balk, i iz njih „isečenih” film-strukturama.

Istraživanje elementarnih ekscitacija u kristalnim filmovima dobija praktičan značaj razvojem eksperimentalnih metoda i tehnike, čime je omogućena izrada tzv. ultratankih filmova debljine od svega nekoliko atomskih slojeva. Jedan od najefikasnijih eksperimentalnih metoda za izradu ovih filmova je tehnika epitaksije molekulskih slojeva [9].

Kao alternativa teorijskom pristupu proučavanja fonona u filmovima, u ovom radu se koristi metod kompjuterske simulacije [3]. Ovaj metod je pokazao naročito dobre rezultate kod ispitivanja sistema koje je nemoguće (ili je to veoma teško) obraditi teorijski [5]. Kao primer tih sistema obrađeni su nehomogeni filmovi [6].

U cilju testiranja rezultata dobijenih kompjuterskom simulacijom, izvršeno je poređenje sa analitičkim rešenjem, naravno u slučaju kada ono postoji [4].

Napomena: u odeljcima koji se bave simulacijom, sve fizičke veličine su pisane bez odgovarajućih jedinica. Podrazumevaju se sledeće jedinice:

- za dužinu:  $1 \times 10^{-10}$  m ,
- za masu:  $1.66 \times 10^{-27}$  kg ,
- za vreme:  $1 \times 10^{-12}$  s .

## 2. Mehanička pobuđenja u kristalnim strukturama

U ovom odeljku se razmatraju mehanička pobuđenja u kristalnim strukturama koje poseduju translacionu invarijantnost, tj. u prostorno neograničenim kristalima. Kao model za ovo razmatranje uzima se idealni rombični kristal sa parametrima rešetke  $a_x, a_y$  i  $a_z$ , i elastičnim međuatomskim potencijalom interakcije definisanim Hukovim konstantama  $C_{\alpha\beta}$  gde  $\alpha$  označava odgovarajuću projekciju ( $\alpha \in \{x, y, z\}$ ). Pretpostaviće se da su torzione konstante  $C_{\alpha\beta}$  ( $\alpha \neq \beta$ ) zanemarljive u odnosu na konstante istezanja  $C_{\alpha\alpha}$ .

Za hamiltonijan koji opisuje mehanička pobuđenja usvojenog modela, uzima se standardni hamiltonijan fononskog sistema u aproksimaciji najbližih suseda [2]:

$$H_{ID} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}} \frac{p_{\vec{n}}^2}{M_{\vec{n}}} + \frac{1}{4} \sum_{\vec{n}, \vec{\lambda}} C_{\vec{n}, \vec{\lambda}} \left( \vec{u}_{\vec{n}} - \vec{u}_{\vec{n}+\vec{\lambda}} \right)^2, \quad (2.1)$$

gde su:  $\vec{p}_{\vec{n}}$  i  $\vec{u}_{\vec{n}}$  - impuls i pomeraj atoma mase  $M_{\vec{n}}$  kristala na čvoru  $\vec{n} = a_x n_x \vec{e}_x + a_y n_y \vec{e}_y + a_z n_z \vec{e}_z$ ,

$$\left( \frac{N_\alpha}{2} \leq n_\alpha \leq \frac{N_\alpha}{2}; N_\alpha \sim 10^8 \right) \quad \alpha \in \{x, y, z\},$$

a  $C_{\vec{n}, \vec{\lambda}} \equiv C_{\vec{\lambda}, \vec{n}}$  - Hukove konstante elastičnosti između atoma na mestu  $\vec{n}$  i njegovih susednih atoma na mestu  $\vec{m} = \vec{n} + \vec{\lambda}$ . Radi jednostavnijeg pisanja, uvode se sledeće smene:

$$M_{n_x, n_y, n_z} \equiv M; \quad C_{n_x n_y n_z; n_x \pm 1, n_y n_z} = C_{n_x n_y n_z; n_x n_y \pm 1, n_z} = C_{n_x n_y n_z; n_x n_y n_z \pm 1} \equiv C_\alpha.$$

Hamiltonijan (2.1) u razvijenom obliku za neograničeni kristal glasi:

$$\begin{aligned} H_B &= \frac{1}{2M} \sum_{\alpha} \sum_{n_x, n_y, n_z} \left( p_{n_x, n_y, n_z}^\alpha \right)^2 + \frac{1}{4} \sum_{\alpha} C_\alpha \sum_{n_x, n_y, n_z} \times \\ &\times \left[ \left( u_{n_x+1, n_y, n_z}^\alpha - u_{n_x, n_y, n_z}^\alpha \right)^2 + \left( u_{n_x-1, n_y, n_z}^\alpha - u_{n_x, n_y, n_z}^\alpha \right)^2 + \right. \\ &+ \left( u_{n_x, n_y+1, n_z}^\alpha - u_{n_x, n_y, n_z}^\alpha \right)^2 + \left( u_{n_x, n_y-1, n_z}^\alpha - u_{n_x, n_y, n_z}^\alpha \right)^2 + \\ &+ \left. \left( u_{n_x, n_y, n_z+1}^\alpha - u_{n_x, n_y, n_z}^\alpha \right)^2 + \left( u_{n_x, n_y, n_z-1}^\alpha - u_{n_x, n_y, n_z}^\alpha \right)^2 \right]. \end{aligned} \quad (2.2)$$

Koristeći gornji hamiltonijan mogu se naći Hamiltonove jednačine [4], a njihovim sređivanjem dolazi se do diferencijalne jednačine kretanja  $\alpha$ -te projekcije pomeraja  $\vec{n}$ -tog atoma:

$$\begin{aligned} \ddot{u}_{n_x, n_y, n_z}^\alpha &- \Omega_\alpha^2 \left( u_{n_x+1, n_y, n_z}^\alpha + u_{n_x-1, n_y, n_z}^\alpha + u_{n_x, n_y+1, n_z}^\alpha + \right. \\ &+ \left. u_{n_x, n_y-1, n_z}^\alpha + u_{n_x, n_y, n_z+1}^\alpha - u_{n_x, n_y, n_z-1}^\alpha - 6u_{n_x, n_y, n_z}^\alpha \right) = 0, \end{aligned} \quad (2.3)$$

gde je obeleženo  $\Omega_\alpha = \sqrt{C_\alpha/M}$ .

Sada se određuje uslov pri kome egzistiraju partikularna rešenja diferencijalne jednačine (2.3) koja predstavljaju monohromatske elastične (fononske) talase. Jedno partikularno rešenje se može potražiti u obliku:

$$u_{k_x, k_y, k_z}^\alpha(t) = \Phi_{k_x, k_y, k_z}^\alpha e^{i(k_x n_x a_x + k_y n_y a_y + k_z n_z a_z - \omega_\alpha t)}. \quad (2.4)$$

Uvrštavanjem (2.4) u (2.3) i skraćivanjem, dobija se uslov:

$$\omega_\alpha^2 - \Omega_\alpha^2(6 - e^{k_x a_x} - e^{-k_x a_x} - e^{k_y a_y} - e^{-k_y a_y} - e^{k_z a_z} - e^{-k_z a_z}) = 0, \quad (2.5)$$

odakle, primenom Ojlerovog obrasca i jedne trigonometrijske transformacije, sledi disperziona relacija koja povezuje frekvenciju fonona sa talasnim brojem:

$$\omega_{k_x, k_y, k_z}^\alpha = 2\Omega_\alpha \sqrt{\sin^2 \frac{k_x a_x}{2} + \sin^2 \frac{k_y a_y}{2} + \sin^2 \frac{k_z a_z}{2}}. \quad (2.6)$$

Opšte rešenje jednačine (2.3) može se napisati u obliku:

$$u_{n_x, n_y, n_z}^\alpha(t) = \int_{-\frac{\pi}{a_x}}^{\frac{\pi}{a_x}} \int_{-\frac{\pi}{a_y}}^{\frac{\pi}{a_y}} \int_{-\frac{\pi}{a_z}}^{\frac{\pi}{a_z}} dk_x dk_y dk_z \Phi_{k_x, k_y, k_z}^\alpha e^{i(k_x n_x a_x + k_y n_y a_y + k_z n_z a_z - \omega_\alpha t)}. \quad (2.7)$$

Za male talasne vektore (napr. atomske oscilacije pobuđene fotonima) i za kristale kubnog sistema ( $a_x = a_y = a_z = a$ ) umesto (2.6) važi približna relacija:

$$\omega_\alpha = a\Omega_\alpha k. \quad (2.8)$$

Označavanjem:

$$v_\alpha = a\Omega_\alpha \quad (2.9)$$

može se uvesti pojam brzine prostiranja akustičkih (mehaničkih) talasa (akustičkih fonona). U slučaju da se mehaničko pobuđivanje vrši u jednom od glavnih pravaca kristala (projekcije talasnog vektora duž ostalih pravaca su jednake nuli), disperziona relacija (2.6) se uprošćava i glasi:

$$\omega = 2\Omega \sin \frac{ka}{2}. \quad (2.10)$$

Ovaj slučaj odgovara oscilovanju tzv. kristalnog lanca (oscilovanje u jednoj dimenziji).

Kod kristala koji imaju dva ili više atoma po primitivnoj ćeliji, fononski spektar pokazuje nove odlike. Naime, za svaku od polarizacija, disperziona relacija poseduje dve grane, akustičku i optičku, sa istoimenim fononima: longitudinalni i transverzalni akustički fononi, i longitudinalni i transverzalni optički fononi [2, 8]. Radi analize ovakvog sistema razmatra se jedan beskonačni kristalni lanac, kod koga atomi mase  $M_1$  leže na „neparnim” pozicijama, dok atomi mase  $M_2$  na „parnim”. Neka su ovi atomi međusobno udaljeni za  $a$ , tako da je dužina ponavljanja  $2a$ . Pod pretpostavkom da interaguju samo najbliži susedni atomi i da je Hukova konstanta identična za sve atomske parove, jednačine kretanja glase:

$$\begin{aligned} M_1 \ddot{u}_{2s+1} + C(2u_{2s+1} - u_{2s+2} - u_{2s}) &= 0 \\ M_2 \ddot{u}_{2s} + C(2u_{2s} - u_{2s+1} - u_{2s-1}) &= 0. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Rešenje ovog problema se može potražiti u obliku progresivnih talasa, ali sa različitim amplitudama za „parne” i „neparne” atome:

$$u_{2s+1}(t) = \Phi_1 e^{i[(2s+1)ka - \omega t]} \quad \text{i} \quad u_{2s}(t) = \Phi_2 e^{i(2ska - \omega t)}. \quad (2.12)$$

Uvrštavanjem (2.12) u (2.11) i sređivanjem, dobija se sistem od dve homogene linearne jednačine:

$$\begin{aligned} \omega^2 M_1 \Phi_1 - 2C \Phi_2 \cos ka + 2C \Phi_1 &= 0 \\ \omega^2 M_2 \Phi_2 - 2C \Phi_1 \cos ka + 2C \Phi_2 &= 0. \end{aligned} \quad (2.13)$$

Sistem (2.13) ima netrivialna rešenja, ako je njegova determinanta jednaka nuli:

$$\begin{vmatrix} 2C - M_1 \omega^2 & -2C \cos ka \\ -2C \cos ka & 2C - M_2 \omega^2 \end{vmatrix} = 0 \quad (2.14)$$

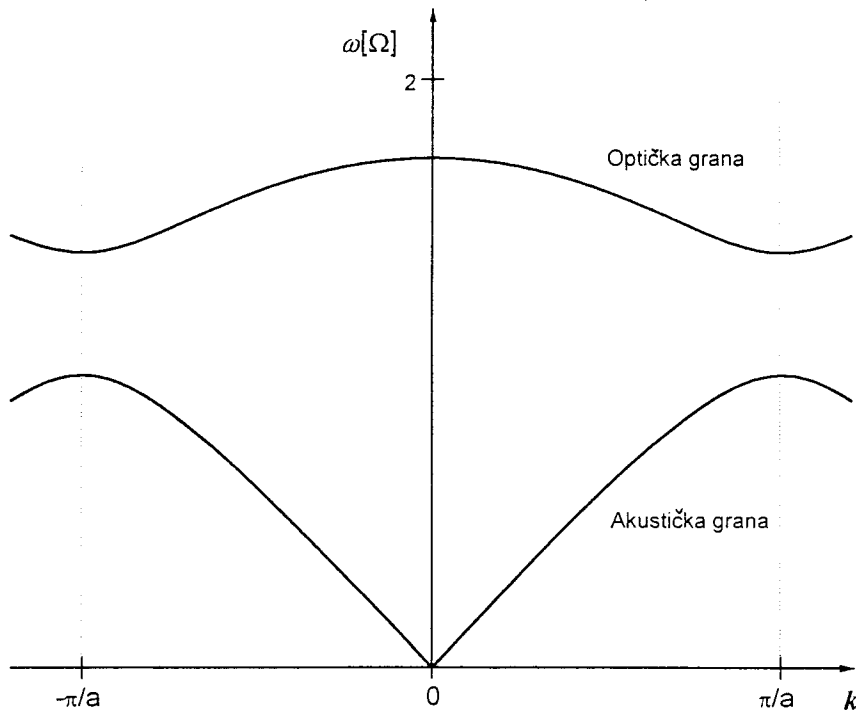
Razvijanjem determinante, dobija se disperziona relacija:

$$\omega^2 = C \left( \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \pm \sqrt{\left( \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)^2 - \frac{4}{M_1 M_2} \sin^2 ka}; \quad k \in \left[ -\frac{\pi}{2a}, \frac{\pi}{2a} \right]. \quad (2.15)$$

Za male vrednosti talasnog vektora  $k$  dobija se:

$$\begin{aligned} \omega^2 &\approx 2C \left( \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \quad (\text{optička grana}), \\ \omega^2 &\approx \frac{2C}{M_1 + M_2} k^2 a^2 \quad (\text{akustička grana}). \end{aligned} \quad (2.16)$$

Na sledećem grafiku (slika 2.1) prikazana je zavisnost  $\omega(k)$  na osnovu relacije (2.15).

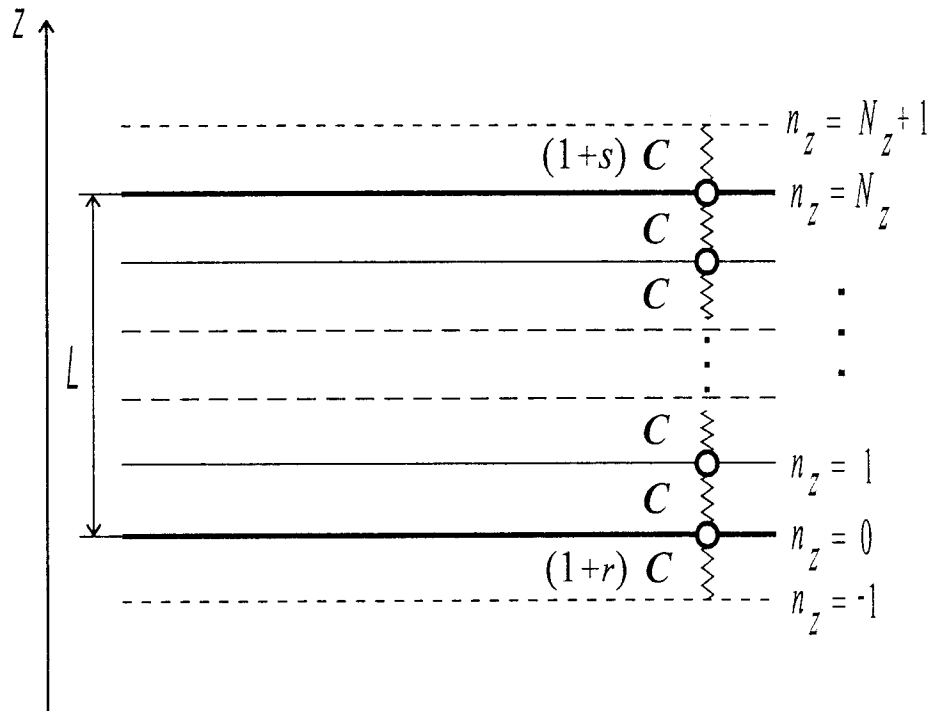


Slika 2.1: Grane optičkih i akustičkih fonona

### 3. Fononi u kristalnim filmovima

Za razliku od prethodnog slučaja, gde je analizirana neograničena i translaciono invarijantna kristalna struktura, u ovom odeljku se razmatra tanki film koji je okarakterisan narušenom translacionom invarijantnošću. Ova struktura ima konačnu debljinu u  $z$  pravcu, dok su  $XY$  ravni beskonačne [4, 10]. Prema tome, film struktura poseduje dve beskonačne granične površine (slika 3.1) paralelne  $XY$  ravnima i to za  $z = 0$  ( $n_z = 0$ ) i  $z = L$  ( $n_z = N_z$ ). Duž  $z$ -ose locirano je  $N_z + 1$  atoma.

$$\left( \frac{N_\beta}{2} \leq n_\alpha \leq \frac{N_\beta}{2}; N_\beta \sim 10^8 \right) \quad \beta \in \{x, y\}; \quad 0 \leq n_z \leq N_z; \quad N_z \sim 10$$



Slika 3.1: Model kristalnog filma



Kao i kod beskonačnih struktura, i ovde se torzione konstante  $C_{\alpha\beta}$  ( $\alpha \neq \beta$ ) zanemaruju u odnosu na konstante istezanja  $C_{\alpha\alpha}$ . Ovakve strukture se nazivaju idealnim kristalnim filmom. Interakcija filma sa graničnom sredinom (supstrat, vazduh) obavlja se na graničnim površinama. Ova interakcija može se opisati preko sledećih definicija:

$$\begin{aligned}
 \text{(i)} \quad & M_{n_x, n_y, n_z} = M & \forall n_z \in [0, N_z] \\
 \text{(ii)} \quad & C_{n_x n_y n_z; n_x \pm 1, n_y n_z} = C_{n_x n_y n_z; n_x, n_y \pm 1 n_z} = C_\alpha & \forall n_z \in [0, N_z] \\
 \text{(iii)} \quad & C_{n_x n_y n_z; n_x, n_y n_z \pm 1} = C_\alpha & \forall n_z \in [1, N_z - 1] \\
 \text{(iv)} \quad & C_{n_x n_y 0; n_x, n_y, -1} = (1+r) C_\alpha \\
 \text{(v)} \quad & C_{n_x n_y N_z; n_x, n_y, N_z+1} = (1+s) C_\alpha \\
 \text{(vi)} \quad & u_{n_x, n_y, -1}^\alpha = u_{n_x, n_y, N_z+1}^\alpha = 0
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

Hamiltonijan (2.1) se za idealni kristalni film može napisati kao zbir dva člana:

$$H_{IF} = H_S + H_B \tag{3.2}$$

prvi član opisuje granične površine, a drugi jezgro filma (balk). U razvijenom obliku ovi hamiltonijani imaju sledeći oblik:

$$\begin{aligned}
 H_S = & \frac{1}{2M} \sum_{\alpha} \sum_{n_x, n_y} \left[ \left( p_{n_x, n_y, 0}^{\alpha} \right)^2 + \left( p_{n_x, n_y, N_z}^{\alpha} \right)^2 \right] + \\
 & + \frac{1}{4} \sum_{\alpha} C_{\alpha} \sum_{n_x, n_y} \left[ 2(1+r) \left( u_{n_x, n_y, 0}^{\alpha} \right)^2 + 2(1+s) \left( u_{n_x, n_y, N_z}^{\alpha} \right)^2 + \right. \\
 & + \left( u_{n_x, n_y, N_z-1}^{\alpha} - u_{n_x, n_y, N_z}^{\alpha} \right)^2 + \left( u_{n_x, n_y, 1}^{\alpha} - u_{n_x, n_y, 0}^{\alpha} \right)^2 + \\
 & + \left( u_{n_x, n_y, 0}^{\alpha} - u_{n_x+1, n_y, 0}^{\alpha} \right)^2 + \left( u_{n_x, n_y, 0}^{\alpha} - u_{n_x-1, n_y, 0}^{\alpha} \right)^2 + \\
 & + \left( u_{n_x, n_y, 0}^{\alpha} - u_{n_x, n_y+1, 0}^{\alpha} \right)^2 + \left( u_{n_x, n_y, 0}^{\alpha} - u_{n_x, n_y-1, 0}^{\alpha} \right)^2 + \\
 & + \left( u_{n_x, n_y, N_z}^{\alpha} - u_{n_x+1, n_y, N_z}^{\alpha} \right)^2 + \left( u_{n_x, n_y, N_z}^{\alpha} - u_{n_x-1, n_y, N_z}^{\alpha} \right)^2 + \\
 & \left. + \left( u_{n_x, n_y, N_z}^{\alpha} - u_{n_x, n_y+1, N_z}^{\alpha} \right)^2 + \left( u_{n_x, n_y, N_z}^{\alpha} - u_{n_x, n_y-1, N_z}^{\alpha} \right)^2 \right];
 \end{aligned} \tag{3.3}$$

$$\begin{aligned}
 H_B = & \frac{1}{2M} \sum_{\alpha} \sum_{n_x, n_y} \left( p_{n_x, n_y, n_z}^{\alpha} \right)^2 + \frac{1}{4} \sum_{\alpha} C_{\alpha} \times \\
 & \times \sum_{n_x, n_y} \left\{ \sum_{n_z=1}^{N_z-1} \left[ \left( u_{n_x+1, n_y, n_z}^{\alpha} - u_{n_x, n_y, n_z}^{\alpha} \right)^2 + \left( u_{n_x-1, n_y, n_z}^{\alpha} - u_{n_x, n_y, n_z}^{\alpha} \right)^2 + \right. \right. \\
 & + \left. \left( u_{n_x, n_y+1, n_z}^{\alpha} - u_{n_x, n_y, n_z}^{\alpha} \right)^2 + \left( u_{n_x, n_y-1, n_z}^{\alpha} - u_{n_x, n_y, n_z}^{\alpha} \right)^2 \right] + \\
 & + \sum_{n_z=2}^{N_z-2} \left[ \left( u_{n_x, n_y, n_z+1}^{\alpha} - u_{n_x, n_y, n_z}^{\alpha} \right)^2 + \left( u_{n_x, n_y, n_z-1}^{\alpha} - u_{n_x, n_y, n_z}^{\alpha} \right)^2 \right] + \\
 & \left. + \left( u_{n_x, n_y, N_z-1}^{\alpha} - u_{n_x, n_y, N_z-2}^{\alpha} \right)^2 + \left( u_{n_x, n_y, 1}^{\alpha} - u_{n_x, n_y, 2}^{\alpha} \right)^2 \right\}.
 \end{aligned} \tag{3.4}$$

Posle uvrštavanja hamiltonijana (3.3) i (3.4) u hamiltonove jednačine i sređivanja, jednačine kretanja glase:

- za  $n_z = 0$  :

$$\begin{aligned} \ddot{u}_{n_x, n_y, 0}^\alpha - \Omega_\alpha^2 & \left( u_{n_x+1, n_y, 0}^\alpha + u_{n_x-1, n_y, 0}^\alpha + u_{n_x, n_y+1, 0}^\alpha + \right. \\ & \left. + u_{n_x, n_y-1, 0}^\alpha + u_{n_x, n_y, 1}^\alpha - 2(1+r)u_{n_x, n_y, 0}^\alpha - 4u_{n_x, n_y, 0}^\alpha \right) = 0, \end{aligned} \quad (3.5)$$

- za  $1 \leq n_z \leq N_z - 1$  :

$$\begin{aligned} \ddot{u}_{n_x, n_y, n_z}^\alpha - \Omega_\alpha^2 & \left( u_{n_x+1, n_y, n_z}^\alpha + u_{n_x-1, n_y, n_z}^\alpha + u_{n_x, n_y+1, n_z}^\alpha + \right. \\ & \left. + u_{n_x, n_y-1, n_z}^\alpha + u_{n_x, n_y, n_z+1}^\alpha - u_{n_x, n_y, n_z-1}^\alpha - 6u_{n_x, n_y, n_z}^\alpha \right) = 0, \end{aligned} \quad (3.6)$$

- za  $n_z = N_z$  :

$$\begin{aligned} \ddot{u}_{n_x, n_y, N_z}^\alpha - \Omega_\alpha^2 & \left( u_{n_x+1, n_y, N_z}^\alpha + u_{n_x-1, n_y, N_z}^\alpha + u_{n_x, n_y+1, N_z}^\alpha + \right. \\ & \left. + u_{n_x, n_y-1, N_z}^\alpha + u_{n_x, n_y, N_z-1}^\alpha - 2(1+s)u_{n_x, n_y, N_z}^\alpha - 4u_{n_x, n_y, N_z}^\alpha \right) = 0. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Rešenje ovog sistema od  $N_z + 1$  homogenih diferencijalno-diferencnih jednačina za male atomske pomeraje možemo potražiti u obliku proizvoda nepoznate funkcije (duž  $z$ -ose) i poznate neizmenjene (u odnosu na „balk” rešenja) harmonijske funkcije položaja (duž  $XY$  ravni), tj.

$$u_{n_x, n_y, n_z}^\alpha(t) = \sum_{k_x, k_y} \sum_{k_z} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{ia(k_x n_x + k_y n_y) - it\omega} \Psi_{n_z}^\alpha; \quad \Psi_{n_z}^\alpha \equiv \Psi_{n_z}^\alpha(k_z, \omega). \quad (3.8)$$

Zamenom ovog izraza u jednačine (3.5-3.7) dobija se:

$$\begin{aligned} (\rho - r) \Psi_0^\alpha + \Psi_1^\alpha &= 0 \\ \Psi_0^\alpha + \rho \Psi_1^\alpha + \Psi_2^\alpha &= 0 \\ &\vdots \\ \Psi_{n_z-1}^\alpha + \rho \Psi_{n_z}^\alpha + \Psi_{n_z+1}^\alpha &= 0 \\ &\vdots \\ \Psi_{N_z-2}^\alpha + \rho \Psi_{N_z-1}^\alpha + \Psi_{N_z}^\alpha &= 0 \\ \Psi_{N_z-1}^\alpha + (\rho - s) \Psi_{N_z}^\alpha &= 0 \end{aligned} \quad (3.9)$$

gde je:

$$\rho = \mathcal{W}_\alpha^2 - 4 \mathcal{F}_{k_x k_y} - 2; \quad \mathcal{W}_\alpha \equiv \frac{\omega}{\Omega_\alpha}; \quad \mathcal{F}_{k_x k_y} \equiv \sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y}{2}. \quad (3.10)$$

Na taj način se sistem od  $N_z + 1$  diferencijalno-diferencnih jednačina (3.5-3.7) svodi na sistem od  $N_z + 1$  homogenih algebarsko-diferencnih jednačina (9). Da bi ovaj sistem imao netrivialnih rešenja, njegova determinanta mora biti jednaka nuli:

$$D_{N_z+1}^{r,s}(\rho) = \begin{vmatrix} \rho - r & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & \rho & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \rho & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & \rho & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & \rho & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & \rho - s \end{vmatrix}_{N_z+1} = 0 \quad (3.11)$$

Za  $r = s = 0$  determinanta predstavlja Čebiševljev polinom druge vrste [11]. Nule ovog polinoma glase:

$$\rho_{\nu_z} = 2 \cos \frac{\pi}{N_z + 2} \nu; \quad \nu = 1, 2, 3, \dots, N_z + 1. \quad (3.12)$$

U ovom slučaju, može se iz (3.10) korišćenjem smene  $\mu = N_z + 2 - \nu_z$  izraziti disperziona relacija za idealan kristalni film kao:

$$\omega_{k_x, k_y}^\alpha(\mu) = 2\Omega_\alpha \sqrt{\sin^2 \frac{a_x k_x}{2} + \sin^2 \frac{a_y k_y}{2} + \sin^2 \frac{\pi}{2(N_z + 2)} \mu} \quad (3.13)$$

ili u sažetijem obliku:

$$\omega_{k_x, k_y}^\alpha(\mu) = 2\Omega_\alpha \sqrt{\mathcal{G}_\mu + \mathcal{F}_{k_x, k_y}}, \quad (3.14)$$

pri čemu je

$$\mathcal{G}_\mu \equiv \sin^2 \frac{a_z k_z(\mu)}{2}, \quad (3.15)$$

gde projekcije talasnog vektora uzimaju sledeće moguće vrednosti:

$$\begin{aligned} k_x &\in \left[ -\frac{\pi}{a_x}, \frac{\pi}{a_x} \right]; & k_y &\in \left[ -\frac{\pi}{a_y}, \frac{\pi}{a_y} \right]; \\ k_z(\mu) &= \frac{\pi}{a_z} \frac{\mu}{N_z + 2}; & \mu &= 1, 2, \dots, N_z + 1. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Na osnovu (3.16) jasno se uočava diskretni karakter  $z$  projekcije talasnog vektora u poređenju sa projekcijom u  $XY$  ravni. Pored ove osobine,  $k_z$  se razlikuje od  $k_x$  i  $k_y$  i po tome što njena minimalna vrednost nije 0, a ni maksimalna nije  $\frac{\pi}{a_\alpha}$ :

$$\begin{aligned} k_z^{\min} &\equiv k_z(1) = \frac{\pi}{a_z} \frac{1}{N_z + 2} > 0 \\ k_z^{\max} &\equiv k_z(N_z + 1) = \left( 1 - \frac{1}{N_z + 2} \right) \frac{\pi}{a_z} < \frac{\pi}{a_z}. \end{aligned} \quad (3.17)$$

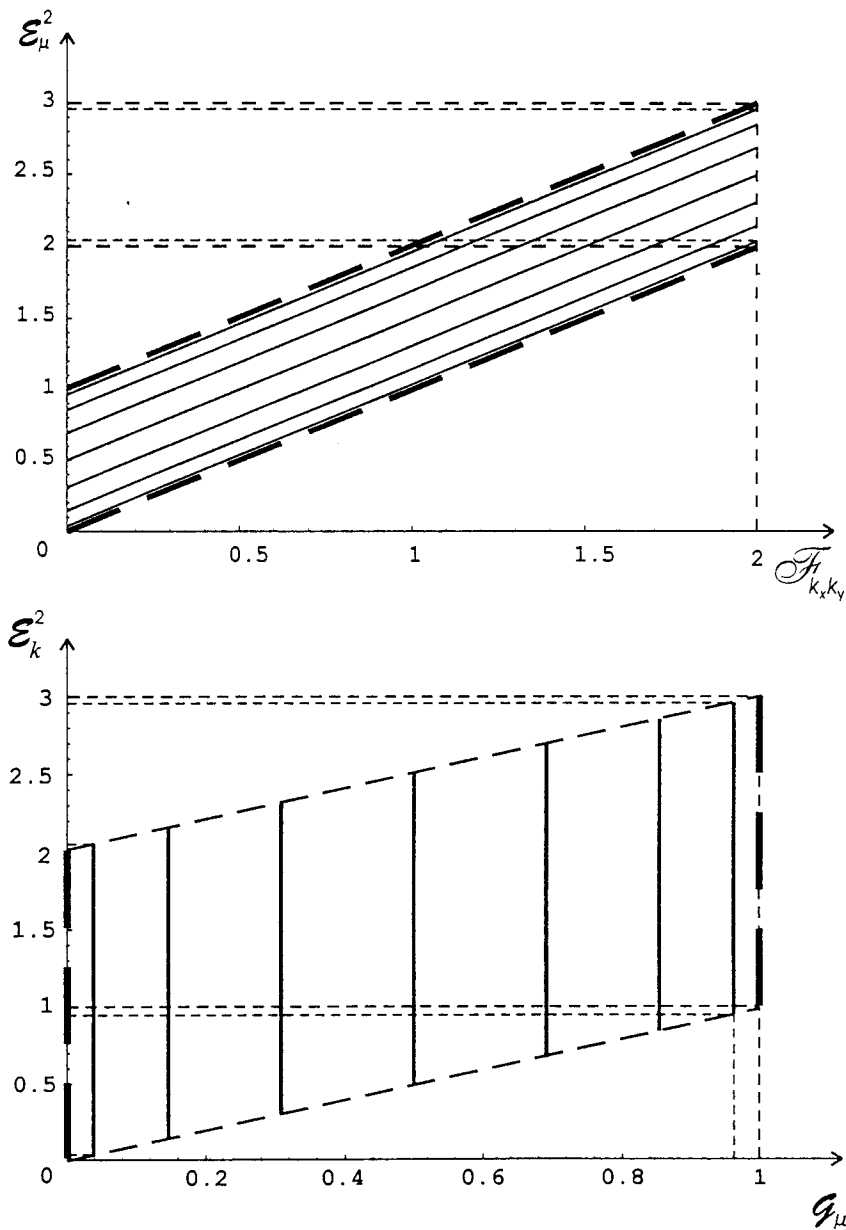
Na slici 3.2a grafički je prikazan ovaj spektar u funkciji  $XY$  ravanskog vektora  $k^2 = k_x^2 + k_y^2$ :  $\mathcal{E}_\mu^2 \equiv \left( \frac{\omega_{k_x, k_y}^\alpha(\mu)}{2\Omega_\alpha} \right)^2 = \mathcal{E}_{k_z(\mu)}^2(\mathcal{F}_{k_x, k_y})$ , a na slici 3.2b isti spektar ali u funkciji  $z$  osnog vektora  $k_z = k_z(\mu)$ :  $\mathcal{E}_k^2 = \mathcal{E}_{k_x, k_y}^2(\mathcal{G}_\mu)$ . Sa grafika se jasno vidi izrazita diskretnost dozvoljenih energetskih nivoa fonona u idealnom filmu u poredjenju sa kontinuumom ovih vrednosti za balk-strukture. Sve tri akustičke frekvencije u balk-strukturama teže nuli kada trodimenzioni (prostorni) vektor  $k = |\vec{k}|$  teži nuli, a minimalne frekvencije fonona u tankoj idealnoj film-strukturi:

$$(\omega_\alpha)_{\min} \equiv \omega_\alpha(k_x = k_y = 0, k_z = k_z^{\min}) \approx \Omega_\alpha \frac{\pi}{N_z + 2} > 0. \quad (3.18)$$

Sa druge strane, maksimalne vrednosti frekvencija akustičkih grana u idealnom beskonačnom kristalu teže vrednosti  $(\omega_\alpha^B)_{max} = 2 \Omega_\alpha \sqrt{3}$  kad  $k_\alpha \rightarrow \pi/a$  ( $\alpha = x, y, z$ ), dok u posmatranom idealnom filmu:

$$(\omega_\alpha)_{max} \equiv \omega_\alpha(k_x = k_y = \pi/a, k_z = k_z^{max}) \approx 2 \Omega_\alpha \sqrt{3} \left[ 1 - \frac{\pi^2/12}{(N_z + 2)^2} \right] < (\omega_\alpha^B)_{max} . \quad (3.19)$$

Takođe se jasno uočava i smanjenje širine frekventne zone fonona u filmu u odnosu na balk-zonu, koja određuje različito termodinamičko ponašanje film-struktura.



Slika 3.2: Frekventni spektar atoma kristalnog filma

Ako se sistem jednačina (3.9) podeli sa  $\Psi_0^\alpha \equiv \Psi_0^\alpha(k_z)$  i poslednja jednačina odbaci, dobija se ovaj sistem jednačina u novom obliku:

$$\begin{aligned} \rho_\nu + \varphi_1 &= 0, & \text{za: } n_z &= 0; \\ 1 + \rho_\nu \varphi_1 + \varphi_2 &= 0, & \text{za: } n_z &= 1; \\ \varphi_{n_z-1} + \rho_\nu \varphi_{n_z} + \varphi_{n_z+1} &= 0, & \text{za: } 2 \leq n_z &\leq N_z - 1, \end{aligned} \quad (3.20)$$

gde je:

$$\varphi_{n_z} \equiv \varphi_{n_z}^\alpha = (\Psi_0^\alpha)^{-1} \Psi_{n_z}^\alpha \implies \Psi_{n_z}^\alpha = \Psi_0^\alpha \varphi_{n_z}^\alpha. \quad (3.21)$$

Poslednja od jednačina (3.20) je zadovoljena za:

$$\varphi_{n_z} = (-1)^{n_z} \{ \mathcal{P} \sin(n_z \zeta_\nu) + \mathcal{Q} \sin[(n_z - 1) \zeta_\nu] \}, \quad (3.22)$$

a na osnovu toga sledi:

$$\varphi_1 = -\mathcal{P} \sin(\zeta_\nu); \quad \varphi_2 = \mathcal{P} \sin(2 \zeta_\nu) + \mathcal{Q} \sin(\zeta_\nu). \quad (3.23)$$

Zamenom ovih izraza u prvu i drugu od (3.20) dobijaju se nepoznati koeficijenti:  $\mathcal{P} \equiv \mathcal{P}_\nu = \rho_\nu \sin^{-1} \zeta_\nu$  i  $\mathcal{Q} \equiv \mathcal{Q}_\nu = -\sin^{-1} \zeta_\nu$ , a vraćajući ih u (3.20), odnosno u (3.21), sledi:

$$\Psi_{n_z}^\alpha(k_z) = (-1)^{n_z} \frac{\sin[(n_z + 1) \zeta_\nu]}{\sin \zeta_\nu} \Psi_0^\alpha. \quad (3.24)$$

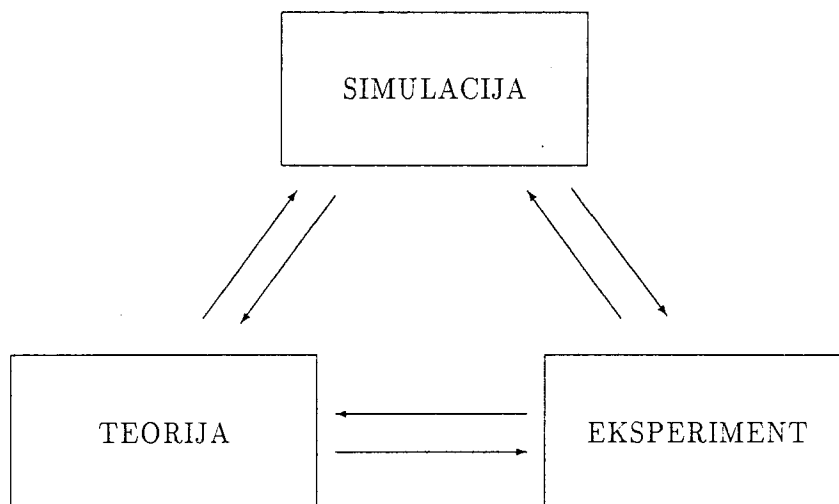
U skladu sa gore izračunatim (kombinovanjem (3.8), (3.24) i standardnim normiranjem [2], lako se dobija konačan izraz za fononske pomeraje u obliku:

$$\begin{aligned} u_{n_x, n_y, n_z}^\alpha(t) &= \sum_{k_x k_y} \sum_{\mu=1}^{N_z-1} \mathcal{N}_{n_z}^\alpha(k_x k_y, \mu) e^{ia(k_x n_x + k_y n_y) - it \omega_{k_x k_y}^\alpha(\mu)} \sin[(n_z + 1) a k_z(\mu)]; \\ \mathcal{N}_{n_z}^\alpha(k_x k_y, \mu) &= (-1)^{n_z} \sqrt{\frac{\hbar}{M N_x N_y N_z \omega_{k_x k_y}^\alpha(\mu)}}. \end{aligned} \quad (3.25)$$

Upoređujući ovde dobijen rezultat sa odgovarajućim za idealne beskonačne strukture može se zaključiti da su mehaničke vibracije u idealnoj neograničenoj strukturi ravni talasi u svim prostornim pravcima, dok u tankom filmu predstavljaju superpoziciju stojećih talasa u  $z$ -pravcu i ravnih talasa u  $XY$  ravnima.

#### 4. Metodi kompjuterske simulacije

Zajedno sa pojavom brzih računarskih mašina, u nauci se razvio jedan sasvim novi pristup proučavanja prirodnih fenomena. Naime, pored tradicionalnih teorijskih (analitičkih) i eksperimentalnih (empirijskih) metoda istraživanja, pojavili su se (i zaslužno zauzeli ravnopravno mesto) metodi kompjuterske simulacije [12, 13]. Oni danas predstavljaju „standardne alate” u mnogim prirodnim naukama, a naročito u fizici.



Slika 4.1: Odnos kompjuterske simulacije prema drugim naučnim metodima

Ovi metodi imaju mnoge prednosti, ali prilikom sagledavanja značaja kompjuterske simulacije ne treba zanemariti ni neke slabosti. Najbolji rezultati istraživanja se mogu dobiti samo uporednom primenom i analizom rezultata i kompjuterske simulacije sa jedne strane, i teorijskih razmatranja i eksperimentalnih merenja sa druge. Na ovaj način do izražaja dolazi komplementarnost ovih pristupa kao što je to slikovito prikazano na dijagramu (slika 4.1).

Kompjuterska simulacija omogućava ispitivanje kompleksnih sistema koje je nemoguće (ili je to veoma komplikovano) teorijski obraditi, ili je to moguće samo pomoću odgovarajućih aproksimacija. U ovim slučajevima kompjuterska simulacija može da ukaže na fizičku opravdanost primenjenih aproksimacija u datom teorijskom modelu, kao i na uticaj ovih aproksimacija na ponašanje parametara ispitivanog kompleksnog sistema. Na ovaj način kompjuterska simulacija postaje sredstvo za procenu validnosti datog teorijskog modela [5].

S druge strane, kompjuterska simulacija u nekim slučajevima premošćuje jaz između teorije i eksperimenta. Naime, neke fizičke veličine je vrlo teško izmeriti eksperimentalno (složena i skupa eksperimentalna tehnika). Pomoću „računarskog eksperimenta” moguće je izmeriti ove veličine [12, 13].

#### 4.1. Osnovi kompjuterske simulacije

Osnovni zahtev koji treba da bude zadovoljen da bi ispitivani sistem mogao da se podvrgne nekom metodu kompjuterske simulacije je da za taj sistem postoji modelni hamiltonijan [12]:

$$H = H(p, q), \quad (4.1)$$

gde su:  $p \equiv \{p_1, p_2, \dots, p_{3N}\}$  i  $q \equiv \{q_1, q_2, \dots, q_{3N}\}$ .

Zbog veze sa eksperimentalnim podacima koji opisuju makroskopsko ponašanje sistema, u statističkoj fizici se posmatraju srednje vrednosti fizičkih veličina [2]:

$$\langle A \rangle = Z^{-1} \int_{\Omega} dp dq \bar{f}(p, q, t) A(p, q, t); \quad Z = \int_{\Omega} dp dq \bar{f}(p, q, t). \quad (4.2)$$

Ovo predstavlja definiciju srednje vrednosti fizičke veličine  $A(p, q, t)$  po statističkom ansamblu, veličine koja nije direktno dostupna u kompjuterskim simulacijama. U simulacijama veličina  $A(p, q, t)$  se, zbog toga, računa duž trajektorije u faznom prostoru. Dakle, u računarskim eksperimentima se računaju vremenske srednje vrednosti:

$$\bar{A}_t = (t - t_0)^{-1} \int_{t_0}^t d\tau A(p(\tau), q(\tau)). \quad (4.3)$$

Na osnovu ergodične hipoteze [2] sledi:

$$\langle A \rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} \bar{A}_t. \quad (4.4)$$

Izraz (4.4) opisuje jedno od ograničenja kompjuterske simulacije. Naime, simulacija ne može beskonačno dugo da prati trajektoriju fazne tačke, pa je vreme opservacije, tj. vreme računarskog eksperimenta je konačno. Trajektorija fazne tačke „prebriše” samo deo faznog prostora. Upravo zbog toga kompjuterska simulacija daje približne rezultate:

$$\langle A \rangle \approx \bar{A}_t. \quad (4.5)$$

Ova aproksimacija je utoliko bolja ukoliko je vreme simulacije duže od karakterističnog vremena sistema [12].

Sledeće značajno ograničenje kompjuterske simulacije je konačna veličina sistema. Vrednosti fizičkih veličina se traže u termodinamičkom limesu, tj. kada broj čestica teži beskonačnosti. Međutim, zbog ograničene brzine računara, mogu se simulirati samo sistemi sa manjim brojem stepeni slobode. Postoje mnogi postupci u cilju ublažavanja ovog „efekta konačne veličine”. Jedan od najpoznatijih je primena periodičnih graničnih uslova [13].

## 4.2. Podela simulacionih metoda

Na osnovu načina propagacije ispitivanog sistema kroz fazni prostor razlikuju se dva različita pristupa, tj. dve grupe simulacionih metoda [12]:

- i) deterministički metodi
- ii) stohastički metodi

Kod determinističkih metoda prelaz iz jedne tačke faznog prostora u susednu, strogo je određen tzv. unutrašnjom dinamikom sistema. Za izabrano početno stanje sistema određeno koordinatama  $q_1(0), q_2(0), \dots, q_{3N}(0)$  i impulsima  $p_1(0), p_2(0), \dots, p_{3N}(0)$  na osnovu zakona klasične mehanike jednoznačno sledi trajektorija u faznom prostoru:  $\{q(t), p(t)\}$ . Osnovna ideja molekulske dinamike je rešavanje jednačina kretanja numerički - pomoću računara [13]. Ovaj postupak je primenjen i u odeljku 5 kod analize fonona u film-strukturama.

Kod stohastičkih metoda, tranzicija između stanja opisana je preko procesa odnosno lanca Markova. Lanac Markova predstavlja probabilistički analogon determinističke dinamike. Evolucija sistema nije jednoznačna, već postoji samo verovatnoća da sistem zauzme određeno stanje u faznom prostoru. Dalje, ovaj proces omogućava simulaciju i modela koji nemaju unutrašnju dinamiku [12]. Predstavnik ove grupe je klasa *Monte Carlo* simulacija [14].



## 5. Simulacija fonona u kristalnim filmovima

Ponašanje i osobine realnih kristala (ograničeni - prostorno neizotropni, sa defektima i sl.) ne mogu se teorijski opisati i matematički egzaktno rešiti. U ovom odeljku ilustrovana je primena metoda molekulske dinamike na određivanje zakona disperzije (mogućih frekvencija oscilovanja atoma) za ograničene i neograničene kristalne lance. Kao primer struktura koje se ne mogu analitički rešiti, ovim metodom su dobijeni fononski spektri nehomogenih kristalnih filmova.

### 5.3. Simulacija oscilovanja atoma u kristalnoj rešetki

Atomi u kristalnoj rešetki usled mehaničkih i termičkih pobuđenja osciluju oko svojih ravnotežnih položaja. Jednačina ovog kretanja atoma dobija se rešavanjem sistema jednačina [1, 5, 8]:

$$M_{n_x, n_y, n_z} \frac{d^2 \vec{r}_{n_x, n_y, n_z}(t)}{dt^2} = \vec{F}_{n_x, n_y, n_z}(t) \quad (5.1)$$

uz odgovarajuće granične uslove ako se vrši simulacija kristalnih filmova. Razvijanjem vektorske funkcije  $\vec{r}_{n_x, n_y, n_z}(t)$  u Tejlorov red u okolini  $t$ , dobijaju se sledeće jednačine:

$$\begin{aligned} \vec{r}_{n_x, n_y, n_z}(t + \Delta t) &= \vec{r}_{n_x, n_y, n_z}(t) + \frac{d\vec{r}_{n_x, n_y, n_z}(t)}{dt} \Delta t + \frac{d^2 \vec{r}_{n_x, n_y, n_z}(t)}{dt^2} \frac{\Delta t^2}{2!} + \\ &+ \frac{d^3 \vec{r}_{n_x, n_y, n_z}(t)}{dt^3} \frac{\Delta t^3}{3!} + \dots \end{aligned} \quad (5.2)$$

$$\begin{aligned} \vec{r}_{n_x, n_y, n_z}(t - \Delta t) &= \vec{r}_{n_x, n_y, n_z}(t) - \frac{d\vec{r}_{n_x, n_y, n_z}(t)}{dt} \Delta t + \frac{d^2 \vec{r}_{n_x, n_y, n_z}(t)}{dt^2} \frac{\Delta t^2}{2!} - \\ &- \frac{d^3 \vec{r}_{n_x, n_y, n_z}(t)}{dt^3} \frac{\Delta t^3}{3!} + \dots \end{aligned} \quad (5.3)$$

Sabiranjem (5.2) i (5.3) i kombinovanjem sa (5.1) dobija se rekurentni obrazac pomoću kojeg se može odrediti položaj svakog atoma u proizvoljnom trenutku  $t_i = i \Delta t$   $i = 1, 2, \dots$  poznavajući položaj atoma u trenutku  $t_0 = 0$ :

$$\vec{r}_{n_x, n_y, n_z}(t + \Delta t) = -\vec{r}_{n_x, n_y, n_z}(t - \Delta t) + 2\vec{r}_{n_x, n_y, n_z}(t) + \frac{\vec{F}_{n_x, n_y, n_z}(t)}{M_{n_x, n_y, n_z}} \Delta t^2. \quad (5.4)$$

Sada još preostaje da se odredi sila  $\vec{F}_{n_x, n_y, n_z}(t)$ .

Vektor odstupanja dva atoma iz njihovog ravnotežnog položaja dat je izrazom:

$$\vec{\chi}_{\vec{n}_1, \vec{n}_2}(t) = [\vec{r}_{\vec{n}_2}(t) - \vec{r}_{\vec{n}_1}(t)] - [(n_2^x - n_1^x)\vec{a}_x + (n_2^y - n_1^y)\vec{a}_y + (n_2^z - n_1^z)\vec{a}_z]. \quad (5.5)$$

Sila kojom atom 2 deluje na atom 1 iznosi:

$$\vec{F}_{\vec{n}_1, \vec{n}_2}(t) = \left. \frac{dU(\xi)}{d\xi} \right|_{\xi=\chi_{\vec{n}_1, \vec{n}_2}(t)} \frac{\vec{\chi}_{\vec{n}_1, \vec{n}_2}(t)}{\chi_{\vec{n}_1, \vec{n}_2}(t)}, \quad (5.6)$$

gde je  $U(\xi)$  potencijal medjuatomske interakcije ( $\xi$  je odstupanje od ravnotežnog položaja). U slučaju da se za model uzima međuatomsko opružno vezivanje:  $U(\xi) = \frac{1}{2}C \xi^2$  pa izraz za silu postaje:  $\vec{F}_{1,2}(t) = C_{1,2} \vec{\chi}_{1,2}(t)$ . U aproksimaciji najbližih suseda, ukupna sila koja deluje na jedan atom glasi:

$$\begin{aligned} \vec{F}_{n_x, n_y, n_z}(t) &= \vec{F}_{n_x, n_y, n_z; n_x-1, n_y, n_z}(t) + \vec{F}_{n_x, n_y, n_z; n_x+1, n_y, n_z}(t) + \\ &+ \vec{F}_{n_x, n_y, n_z; n_x, n_y-1, n_z}(t) + \vec{F}_{n_x, n_y, n_z; n_x, n_y+1, n_z}(t) + \\ &+ \vec{F}_{n_x, n_y, n_z; n_x, n_y, n_z-1}(t) + \vec{F}_{n_x, n_y, n_z; n_x, n_y, n_z+1}(t). \end{aligned} \quad (5.7)$$

Za kristalni lanac, dobija se jednostavniji izraz:

$$\vec{F}_n(t) = \vec{F}_{n, n-1}(t) + \vec{F}_{n, n+1}(t). \quad (5.8)$$

Da bi se za traženu tačnost  $\Delta\vec{r}$  i ukupno vreme simulacije  $T$  mogao odrediti korak iteracije  $\Delta t$ , neophodno je izvršiti procenu greške ovog iterativnog postupka. Najveći doprinos greški iteracije čini prvi najveći zanemareni član u izrazu (5.4), a to je član uz  $\Delta t^4$ , s obzirom da član uz  $\Delta t^3$  otpada. Greška prve iteracije:

$$|\Delta\vec{r}(t_1)|_{max} \approx 2 \cdot \frac{1}{4!} \max_{t \in (0, t_1)} |\vec{r}^{(IV)}(t)| \Delta t^4. \quad (5.9)$$

Posle  $i = \frac{T}{\Delta t}$  iteracija, akumulirana geška je data sa:

$$|\Delta\vec{r}| = |\Delta\vec{r}(t_i)|_{max} \approx \frac{T}{12} \max_{t \in (0, T)} |\vec{r}^{(IV)}(t)| \Delta t^3. \quad (5.10)$$

Dakle, da bi se postigla tačnost  $\Delta\vec{r}$  potrebno je za korak iteracije uzeti vrednost:

$$\Delta t = \sqrt[3]{\frac{12|\Delta\vec{r}|}{T \max_{t \in (0, T)} |\vec{u}^{(IV)}(t)|}}, \quad (5.11)$$

gde je radijus vektor  $\vec{r}(t)$  zamenjen odstupanjem radijus vektora od ravnotežnog položaja  $\vec{u}(t)$  s obzirom da se ta dva vektora razlikuju samo za konstantu.

Za prostiranja talasa kroz neograničeni kristal, gde je  $u(t) = \text{Re}|Ae^{i\omega t}|$  formula (5.11) dobija sledeći oblik:

$$\Delta t = \sqrt[3]{\frac{12|\Delta\vec{r}|}{TA\omega^4}}. \quad (5.12)$$

Kod simulacije fonona u kristalnom lancu, pomeraj atoma možemo izraziti kao superpoziciju fononskih talasa:

$$u(t) = \sum_{\mu=1}^{N_z+1} \text{Re} |Ae^{i\omega t}|.$$

U skladu sa ovim,

$$\max_{t \in [0, T]} u^{IV}(t) < \sum_{\mu=1}^{N_z+1} A_{\mu} \omega_{\mu}^4 \approx \bar{A} \sum_{\mu=1}^{N_z+1} \omega_{\mu}^4 = 16\bar{A}\Omega^4 \sum_{\mu=1}^{N_z+1} \sin^4 \frac{\mu\pi}{N_z+1} \approx 16\bar{A}\Omega^4 \frac{3}{8} N_z. \quad (5.13)$$

Zamenom (5.13) u (5.12) dobija se:

$$\Delta t \approx \frac{1}{\Omega} \sqrt[3]{\frac{2\Delta r}{N_z \bar{A} \Omega T}} . \quad (5.14)$$

Narušena translaciona invarijantnost u jednom pravcu kod kristalnih filmova omogućava stvaranje stojećih talasa duž tog privilegovanog pravca [4, 10]. Oscilovanje atoma u kristalnim filmovima će biti kombinacija progresivnih talasa u  $XY$  ravnima i stojećih talasa u  $z$ -pravcima. Međutim, od najvećeg su interesa baš ova pobuđenja duž ovih ograničenih pravaca. Njih, za početak, možemo proučavati u jednodimenzionim kristalnim strukturama, tzv. kristalnim lancima. Zbog toga će se sve simulacije u ovom radu vršiti upravo za kristalne lance. Znajući fononski spektar za kristalni lanac (određen talasnim vektorom  $k_z(\mu)$ ), lako se vrši uopštavanje na trodimenzioni kristalni film korišćenjem relacije (3.13).

#### 5.4. Određivanje disperzione relacije za prostorno neograničene kristale

S obzirom da se mehanička pobuđenja u prostorno neograničenim kristalima prenose u obliku progresivnih talasa, oscilovanje svakog atoma u kristalnom lancu možemo predstaviti zakonom  $x_n(t) = A \sin(\omega t + n\varphi)$ , gde je  $\varphi$  fazna razlika između dve uzastopne oscilacije. Poznavajući  $\varphi$  možemo odrediti talasni vektor [5]:

$$k = \frac{\omega}{v} = \frac{\omega}{\Delta x / \Delta t} = \frac{\omega \Delta t}{a} = \frac{\varphi}{a} . \quad (5.15)$$

Potrebno je, dakle, odrediti  $\varphi$ , na osnovu simuliranih vrednosti položaja atoma u  $N_r$  trenutaka:  $x_1(t_i)$   $i = 1, 2, \dots, N_r$ . Ovaj problem ćemo rešiti metodom najmanjih kvadrata, formirajući izraz:

$$I(\varphi) = \sum_{i=1}^{N_r} [x_1(t_i) - A \sin(\omega t + \varphi)]^2 ,$$

gde se  $\varphi$  dobija kao minimum ove sume, tj.

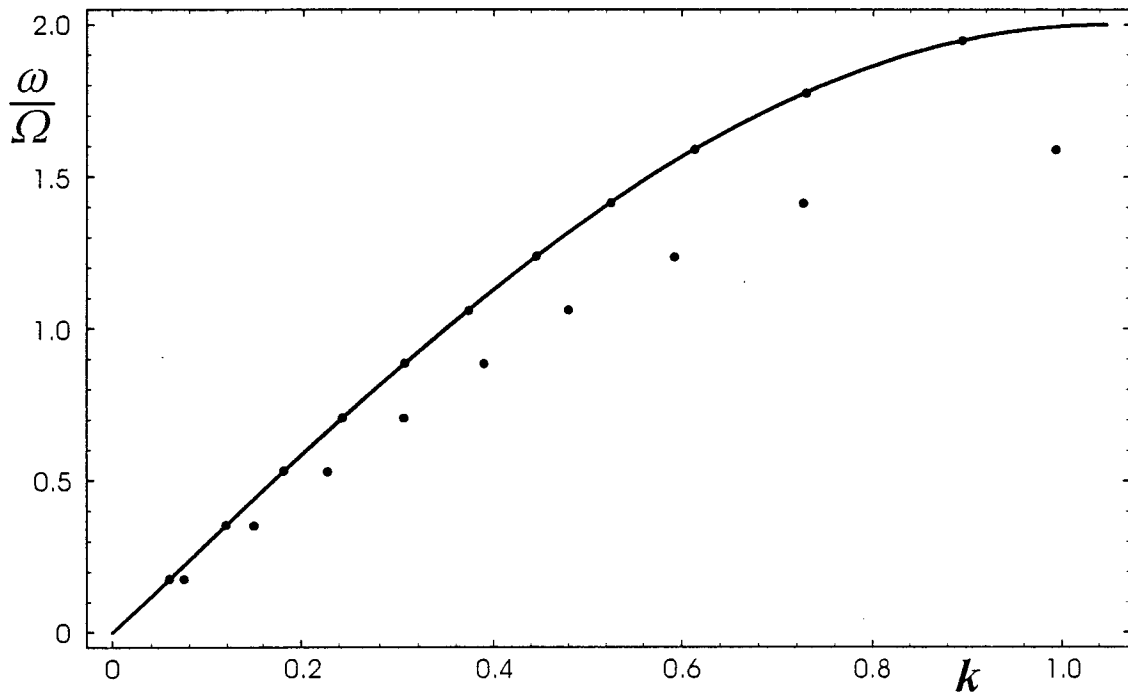
$$\frac{dI(\varphi)}{d\varphi} = 0 \Rightarrow \varphi \Rightarrow k . \quad (5.16)$$

Prema tome, da bi odredili disperzionu relaciju  $\omega = \omega(k)$  potrebno je simulirati prostiranje mehaničkih talasa kroz kristal, različitih frekvencija  $\omega_i$ , na osnovu čega se navedenom numeričkom analizom računa odgovarajući talasni broj  $k_i$ . Zbog prirode algoritma, ne može se raditi sa beskonačnim lancem, pa se računa sa onoliko atoma koliko je potrebno da za vreme računanja talasni front ne stigne do kraja lanca, tj. ne stigne da se reflektuje od njegovog kraja. Ovo se postiže ako za broj atoma u lancu ( $N$ ) važi relacija:

$$N > \frac{vt_{uk}}{a} = t_{uk} \sqrt{\frac{C}{M}} .$$

„Utisak beskonačnosti” na početku lanca postizemo tako što prvi atom u lancu prinudno oscilujemo po zakonu  $x_0(t) = A \sin \omega t$ . Da bi se dobili čisto transverzalni talasi, atomima se ne dopušta kretanje u pravcu lanca, već samo u pravcu normalnom na lanac. Kao i kod simulacija prostiranja longitudinalnih talasa u beskonačnom kristalnom lancu, i u ovom slučaju prvi atom

u nizu prinudno zaoscilujemo, ali sada u  $y$ -pravcu, i na osnovu fazne razlike susednih oscilacija (vremensko kašnjenje) određujemo talasni vektor [3]. Na sledećem grafiku (slika 5.1) dati su rezultati simulacije prostiranja longitudinalnih i transverzazalnih talasa kroz kristalni lanac sa parametrima:  $a = 3$ ,  $M = 50$ ,  $C = 100$ . Radi boljeg upoređivanja, na istom grafiku prikazane su disperzione relacije za obe polarizacije, kao i teorijska kriva  $\omega(k) = 2\Omega \sin \frac{ka}{2}$ .



Slika 5.1: Disperziona kriva

### 5.5. Metod Furijeove analize za određivanje fononskog spektra

Da bi na osnovu simuliranih pomeraja atoma u kristalu  $u_n(k\Delta t)$  odredili fononski spektar datog sistema primenićemo metod Furijeove analize. Pošto se kretanje atoma oko ravnotežnih položaja u kristalima može prikazati kao superpozicija fononskih talasa, pomeranje svakog atoma se može predstaviti sledećim izrazom:

$$u_n(t) = \sum_{\mu=1}^{N_z+1} \operatorname{Re} \left| u_{\mu} e^{i\omega_{\mu} t} \right|. \quad (5.17)$$

S druge strane,  $u_n(k\Delta t)$  možemo razviti u Furijeov red:

$$u_n(t) = \sum_{k=0}^{\left[ \frac{2\Omega}{\Delta\Omega} \right]} \operatorname{Re} \left| u_k e^{ik\Delta\Omega t} \right|, \quad (5.18)$$

gde je  $\Delta\Omega$  tačnost sa kojom se određuje frekvencija fonona. (Napomena: Za  $k_{max} = \frac{2\Omega}{\Delta\Omega}$  fononi će ležati u intervalu  $[0, \Omega]$ . Za više frekvencije treba povećati gornju granicu za  $k$ ).

Koeficijenti  $u_k$  su određeni sledećim integralom:

$$u_k(k\Delta\Omega) = \mathcal{F}_\omega\{u_n(t)\} = \frac{\Delta\Omega}{\pi} \left| \int_0^{\lfloor \frac{2\pi}{\Delta\Omega} \rfloor} u_n(t) e^{-ik\Delta\Omega t} dt \right|. \quad (5.19)$$

Pošto nemamo analitički oblik za  $u_n(t)$  već samo simulirane vrednosti u tačkama  $0, \Delta t, 2\Delta t, \dots$  gornji integral računamo pomoću nekog postupka numeričke integracije, napr. Simsonovom ekvidistantnom formulom.

Upoređujući izraze za  $u_n(t)$  date sa (5.17) i (5.18) lako se zaključuje da će koeficijenti  $u_k$  biti značajno različiti od 0 samo za

$$\omega_\mu \approx k \Delta\Omega. \quad (5.20)$$

Prema tome, treba izračunati koeficijente  $u_k$  za svako  $k \in \left[0, \frac{2\Omega}{\Delta\Omega}\right]$ . Pikovi diskretne funkcije  $\mathcal{F}_k\{u_n(t)\}$  lokalizuju fononske frekvencije  $\omega_\mu$ ; ( $\omega_\mu = k_\mu \Delta\Omega$ ), sa preciznošću  $\pm \frac{\Delta\Omega}{2}$ , gde je  $\mu = 1, 2, \dots, N_z + 1$ , a  $N_z + 1$  broj fonona u spektru. Da bi izbegli računanje svih koeficijenata  $u_k$ , što zahteva dosta kompjuterskog vremena, bolje je nekim numeričkim postupkom (u ovom slučaju je najefikasniji metod polovljenja) naći sve nule funkcije

$$u'_k = \frac{u_{k+1} - u_{k-1}}{2 \Delta\Omega}. \quad (5.21)$$

Da bi osigurali prisustvo svih fonona u spektru, umesto razvijanja u Furijeov red funkcije  $u_n(t)$ , zgodnije je razvijati funkciju:

$$U(t) = \frac{\sum_{n=0}^{N_z+1} u_n(0) u_n(t)}{\sum_{n=0}^{N_z+1} u_n(0) u_n(0)}. \quad (5.22)$$

Da bi se minimiziralo vreme potrebno za računanje integrala (5.19), bitno je proceniti minimalan broj tačaka koje je dovoljno uzeti da bi fononske frekvencije još uvek ležale u intervalu  $(\omega_i - \Delta\Omega, \omega_i + \Delta\Omega)$ . Da bi se to postiglo, greška numeričke integracije treba da je manja od varijacije pika u okolini date frekvencije:

$$E(\Delta\Omega) < \frac{1}{2} \left. \frac{dU(\omega)}{d\omega} \right|_{\omega=\omega_\mu} \Delta\Omega, \quad (5.23)$$

$$\begin{aligned} E(\Delta\Omega) &= \frac{2\pi/\Delta\Omega}{180} \Delta t^4 \max_{t \in [0, 2\pi/\Delta\Omega]} \left| \frac{\Delta\Omega}{\pi} U(t) e^{-i\omega_\mu t} \right|^{(IV)} < \\ &< \frac{2\pi/\Delta\Omega}{180} \Delta t^4 \frac{\Delta\Omega}{\pi} \sum_{k=1}^{N_z} (\omega_k - \omega_\mu)^4 \approx \frac{1}{90} \Delta t^4 N_z \Omega^4, \end{aligned} \quad (5.24)$$

$$\frac{1}{2} \frac{dU(\omega)}{d\omega} \Big|_{\omega=\omega_\mu} \Delta\Omega = \frac{\Delta\Omega^2}{2\pi} \left| \int_0^{\lfloor \frac{2\pi}{\Delta\Omega} \rfloor} U(t)(-it)e^{-i\omega_\mu t} dt \right| < \frac{\Delta\Omega^2}{2\pi} N_z \frac{(2\pi/\Delta\Omega)^2}{2} = \pi N_z. \quad (5.25)$$

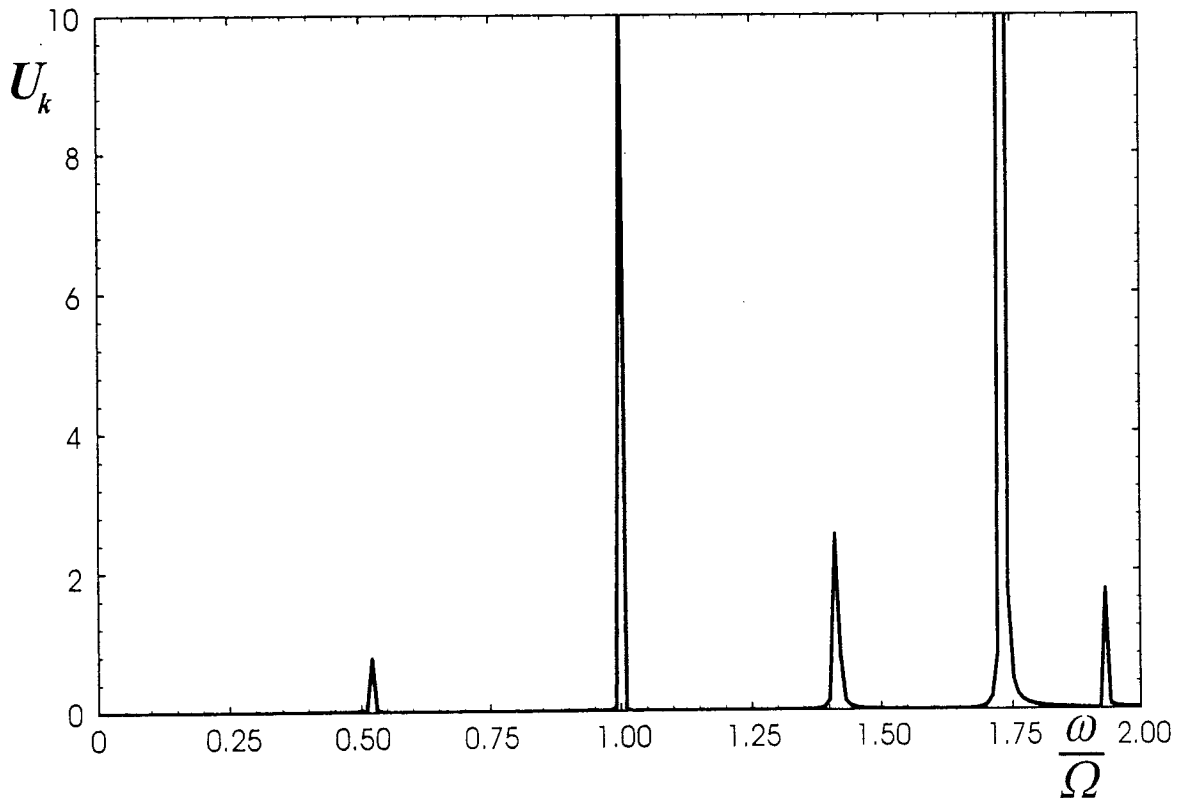
Zamenom (5.24) i (5.25) u (5.23) dobija se:

$$\Delta t = \frac{\sqrt[4]{90\pi}}{\Omega} \approx \frac{4}{\Omega}. \quad (5.26)$$

Konačno, broj tačaka za numeričku integraciju:

$$m = \frac{T}{\Delta t} = \frac{2\pi/\Delta\Omega}{4/\Omega} \approx \frac{3}{2} \frac{\Omega}{\Delta\Omega}. \quad (5.27)$$

Kao ilustracija gore opisanog postupka, na sledećem grafiku (slika 5.2) prikazan je rezultat Furijeove analize za homogeni kristalni film debljine 5 atoma.



Slika 5.2: Zavisnost koeficijenta  $U_k$  u funkciji frekvencije fonona

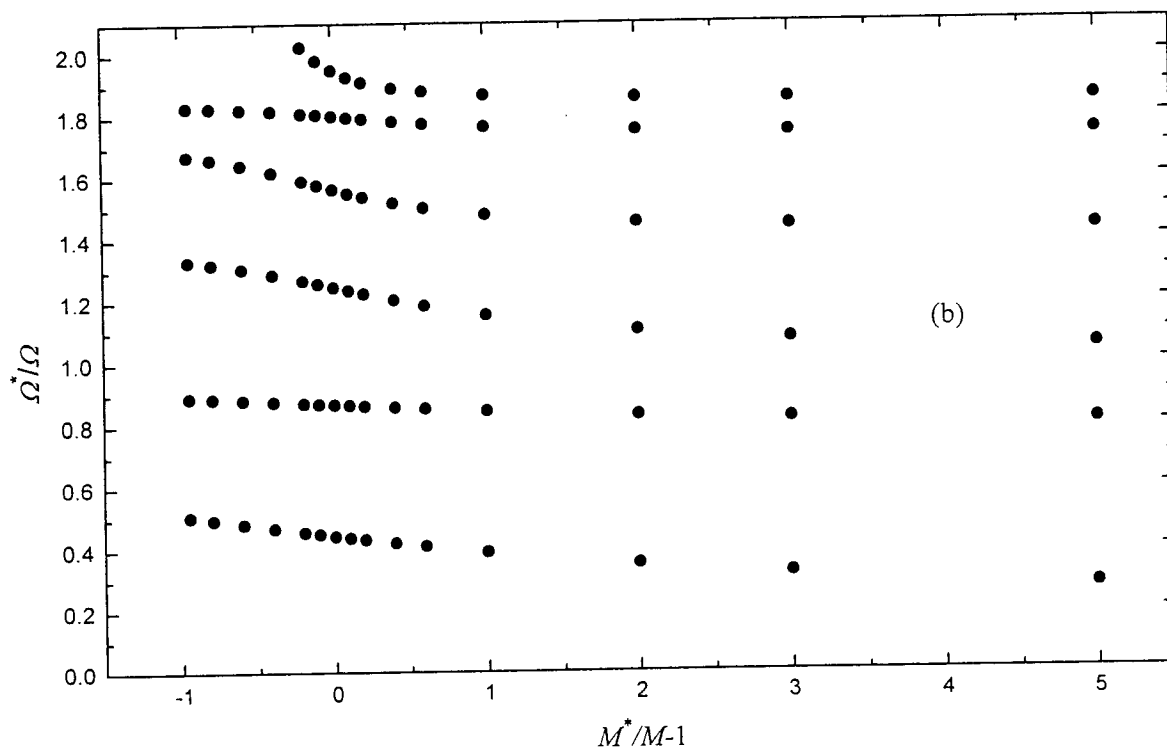
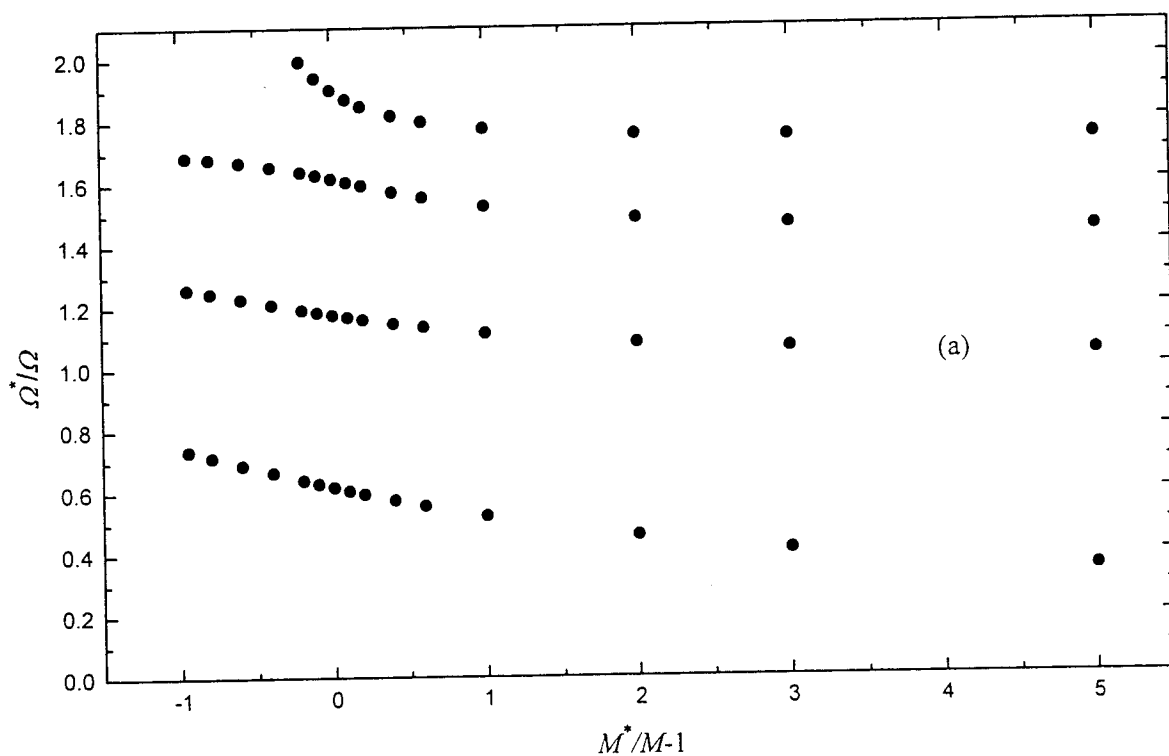
## 5.6. Fononski spektar nehomogenih filmova

U ovom odeljku se opisani simulacioni metod primenjuje za određivanje fononskog spektra kod nehomogenih filmova. Pod nehomogenim filmom podrazumevaćemo homogeni film (masa atoma  $M$ , Hukova konstanta  $C$ ) kod koga su jedan (ili više) slojeva zamenjeni slojem atoma mase  $M^*$  i Hukove konstante  $C^*$ . U daljem radu, ograničavamo se na filmove sa samo jednim slojem atoma nečistoće (jedan strani atom u lancu), i u računarskim eksperimentima ćemo ga uvek postaviti na sredinu filma (lanca). Opravdanje za ovakav izbor položaja atoma leži u činjenici da se pokazalo da se fononski spektar nehomogenog filma vrlo malo menja u funkciji položaja nečistoće u filmu [6]. Međutim, ovo važi samo u slučaju kada je  $C^* \approx C$ . Pošto u većini slučajeva interakcija ne zavisi od mase umetnutog atoma, a radi se o srodnim elementima (napr. metal u metalu), kao i da je razlika u masi ovih atoma dovoljno mala da ne dođe do deformacije filma, pretpostavićemo da je ovaj uslov zadovoljen. U protivnom, treba voditi računa i o položaju stranog atoma.

Na sledećim graficima (sl.5.3a-d) prikazani su fononski spektri nehomogenih filmova sa debljinama  $N_z + 1 = 4, 6, 8, \text{ i } 10$ . Korišćeni su sledeći podaci o filmu - kristalnom lancu:  $M = 50$ ,  $C = 100$ ,  $a = 3$ .

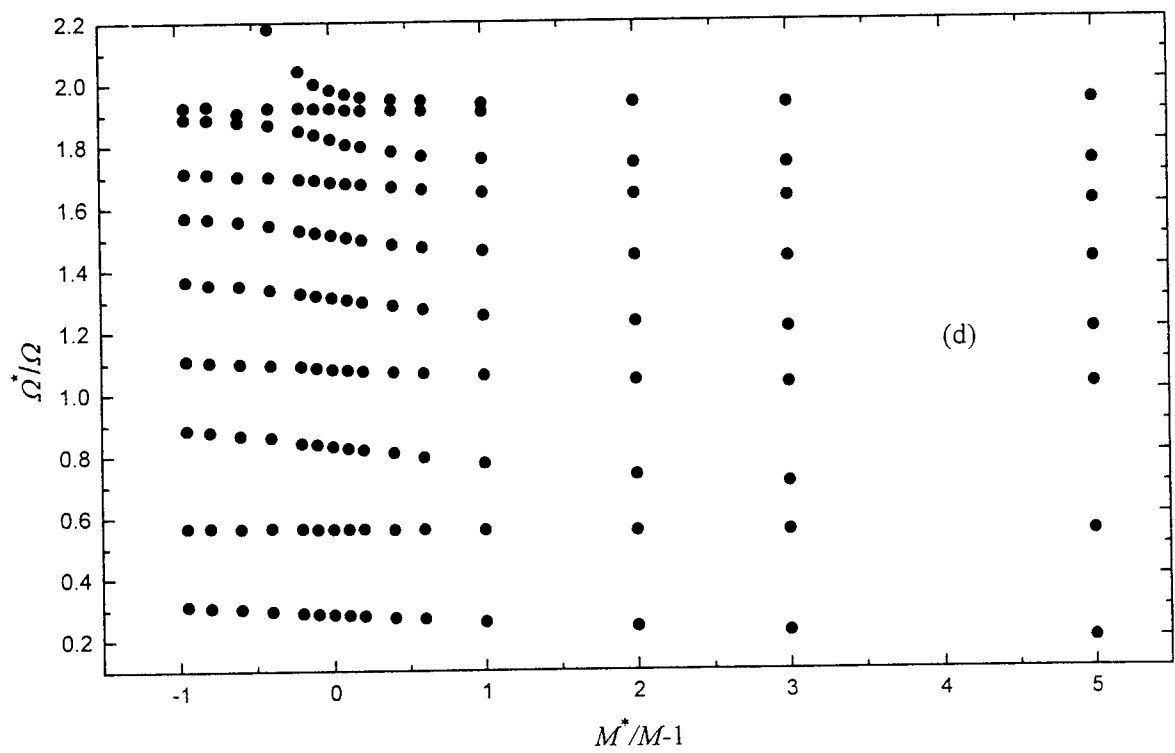
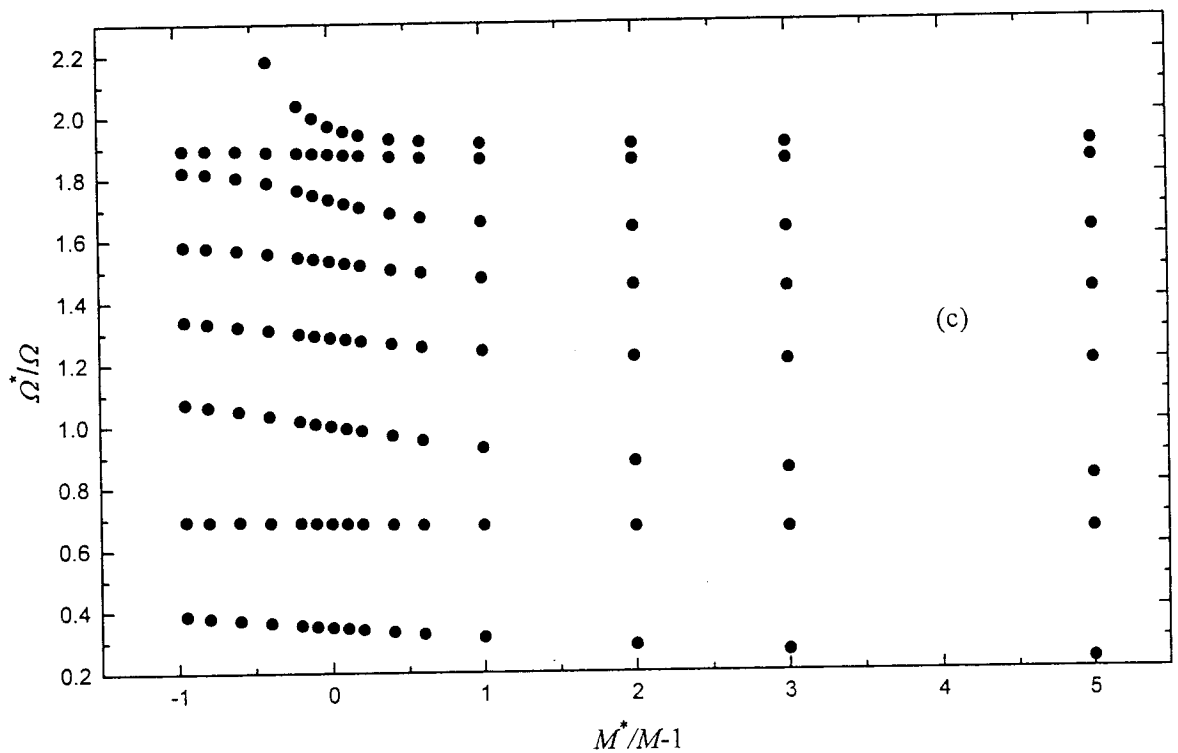
Furije analiza rađena je sa rezolucijom:  $\Delta\Omega = \frac{2\Omega}{1000}$ .

Grafici predstavljaju zavisnosti relativne (bezdimezione) fonoske frekvencije  $\frac{\omega_\mu^*}{\Omega}$  u funkciji redukovane bezdimezione mase atoma  $\frac{M^*}{M} - 1$ .



Slika 5.3a-b: Fononski spektri nehomogenih filmova sa (a) četiri i (b) šest slojeva





Slika 5.3c-d: Fononski spektri nehomogenih filmova sa (c) osam i (d) deset slojeva

U skladu sa očekivanjima, a na osnovu analize ovih grafika, mogu se doneti sledeći kvalitativni zaključci.

1. U slučaju da je  $M^* < M$  (tj.  $\Omega^* > \Omega$ ) fonoski spektar se pomera ka višim frekvencijama.
2. U slučaju da je  $M^* > M$  (tj.  $\Omega^* < \Omega$ ) fonoski spektar se pomera ka nižim frekvencijama.
3. Promena frekvencije je izraženija za fonone sa višom frekvencijom, kao i za filmove male debljine (ultratanki filmovi).
4. Linearna aproksimacija u širem intervalu mase  $M^*$  je zadovoljavajuća samo za niže-frekventne fonone (u Debajevoj, kontinuumskoj aproksimaciji).

Pokušajmo sada da damo i neke kvantitativne odnose koji bi opisali fonoski spektar nehomogenih filmova. U tom cilju zavisnost fononske frekvencije u funkciji mase stranog atoma potražimo u obliku:

$$\frac{\omega_\mu^*}{\omega_\mu} - 1 = f\left(\frac{M^*}{M} - 1\right). \quad (5.28)$$

Pošto je za fizičke osobine najodgovornija najniža frekvencija  $\omega_1$  koja se u vrlo širokom intervalu mase menja po linearnoj zakonitosti, za funkciju  $f$  ćemo izabrati upravo linearnu funkciju, tj.:

$$\frac{\omega_\mu^*}{\omega_\mu} - 1 = k_\mu \left(\frac{M^*}{M} - 1\right). \quad (5.29)$$

Koeficijente  $k_\mu$  dobijamo povlačeći tangente u tački:  $M^* = M$  (tj.  $\frac{M^*}{M} - 1 = 0$ ). Vrednosti ovih koeficijenata su prikazane u sledećoj tabeli:

$k_\mu$	$N_z = 3$	$N_z = 5$	$N_z = 7$	$N_z = 9$
$k_1$	-0.179	-0.139	-0.105	-0.074
$k_2$	-0.068	-0.024	-0.014	-0.001
$k_3$	-0.069	-0.087	-0.080	-0.073
$k_4$	-0.179	-0.087	-0.045	-0.037
$k_5$		-0.027	-0.046	-0.054
$k_6$		-0.142	-0.081	-0.052
$k_7$			-0.013	-0.030
$k_8$			-0.116	-0.079
$k_9$				-0.015
$k_{10}$				-0.096

Analizom tabelarnih vrednosti može se zaključiti da za koeficijente  $k_\mu$  približno važi:

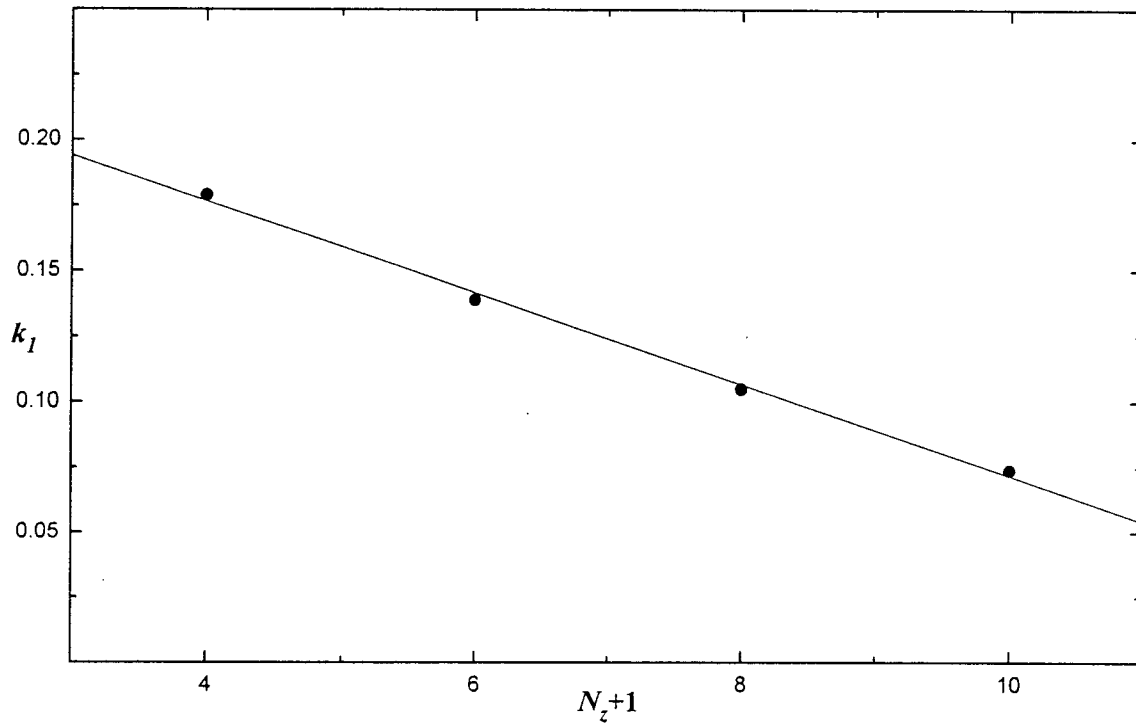
$$k_\mu \approx k_{N_z+1-\mu}$$

(što je debljina filma manja, slaganje je bolje). Na osnovu vrednosti koeficijenata  $k_\mu$  uočava se da uticaj nečistoća na fonoski spektar opada sa povećanjem debljine filma, što je opet u skladu sa očekivanjima.

Pošto u izrazu za aktivacionu temperaturu fonona [4]:  $k_B T_{ac} = \hbar \omega_1$  figurise  $\omega_1$ , ovde ćemo dati samo zavisnost frekvencije  $\omega_1^*(M^*)$ :

$$\frac{\omega_1^*}{\omega_1} - 1 = k_1 \left(\frac{M^*}{M} - 1\right). \quad (5.30)$$

Da bi odredili kako se menja  $k_1$  u funkciji debljine filma, na slici 5.4 prikazana je zavisnost  $k_1 = k_1(N_z + 1)$ .



Slika 5.4: Zavisnost  $k_1$  u funkciji debljine filma

Na osnovu (5.30), za frekvenciju  $\omega_1$  dobija se:

$$\omega_1^* \approx \omega_1 \left[ 1 + k_1 \left( \frac{M^*}{M} - 1 \right) \right] . \quad (5.31)$$

Aktivaciona temperatura za tanki film je onda:

$$T_{ac} = \frac{\hbar\omega_1}{k_B} \quad (5.32)$$

Iz (5.31) i (5.32) sledi:

$$T_{ac}^* = T_{ac} \left[ 1 + |k_1| \left( \frac{M^*}{M} - 1 \right) \right] \quad (5.33)$$

Prema tome, aktivaciona temperatura nehomogenih filmova koji sadrže jedan sloj lakih atoma viša je nego aktivaciona temperatura homogenih filmova.

## **6. Zaključak**

U ovom radu ispitivana su mehanička pobuđenja u prostorno ograničenim i neograničenim kristalnim strukturama. Teorijskim putem su dobijeni fononski spektri beskonačnih kristala, kao i odgovarajućih kristalnih filmova.

Pored analitičkog pristupa za idealne strukture, opisan je i primenjen metod kompjuterske simulacije za ispitivanje fonona u tankim kristalnim filmovima koji se ne mogu obraditi analitički. Simulirani pomeraji atoma u kristalnoj rešetki podvrgnuti su Furijeovoj analizi, na osnovu čega je dobijen fononski spektar.

Upoređivanjem spektara idealnih filmova dobijenih simulacijom sa rezultatima dobijenim teorijskim putem, potvrđena je ispravnost metoda kompjuterske simulacije. Poseban značaj simulacija ima kod istraživanja sistema koji se ne mogu tretirati analitički. Kao ilustracija ovoga, opisani postupak simulacije primenjen je za određivanje fononskih spektara nehomogenih kristalnih filmova, gde se pod nehomogenim filmom podrazumeva film koji poseduje raznorodne atomske slojeve. Ovaj rad obrađuje slučaj sa jednim slojem „stranih” atoma.

Na osnovu rezultata simulacije, dobijeni su grafici koji opisuju zavisnost fononskog spektra od mase atoma umetnutog sloja za razne debljine filma. Utvrđeno je da se fononski spektar nehomogenih filmova pomera ka višim frekvencijama sa smanjivanjem mase umetnutog atomskog sloja, i obrnuto, smanjuje sa povećanjem ove mase. Promena ovih frekvencija izraženija je za fonone sa višom frekvencijom, kao i za filmove male debljine (ultratanki filmovi).

Dalje, analizom ovih grafika dobijen je izraz koji opisuje promenu aktivacione temperature fonona u funkciji mase atoma umetnutog sloja. Pokazano je da je aktivaciona temperatura nehomogenih filmova sa jednim slojem lakih atoma viša nego kod odgovarajućih homogenih filmova.

## 7. Literatura

- [1] Č.Kittel: Uvod u fiziku čvrstog stanja, *Savremena administracija*, Beograd 1970.
- [2] B. Tošić: Statistička fizika, *Institut za fiziku PMF*, Novi Sad 1978.
- [3] R.Firstenberg: Oscilovanje atoma kristalnog filma, *Nagradjeni temat Univerziteta u Novom Sadu*, Novi Sad 1995.
- [4] J.P.Šetrajić, S.Lazarev i D.Lj.Mirjanić: Analiza fononskih stanja kristalnih film-struktura, *Zbornik radova 22. JUMEH D-77*, 453-458 (1997).
- [5] R.Firstenberg: Kompjuterska simulacija i analiza prenosa mehaničkih pobuđenja kroz kristalne sisteme, *Zbornik radova 22. JUMEH D-81*, 477-482 (1997).
- [6] R. Firstenberg: Phonon Spectra of Ultrathin Non-Homogeneous Crystalline Films, *ICAM/EMRS '97 Spring Meeting*, Strasbourg 1997.
- [7] W. Jones and N. H. March: Theoretical Solid State Physics, *Dover*, New York 1985.
- [8] I. Supek: Teorijska fizika i struktura materije, *Školska knjiga*, Zagreb 1977.
- [9] Ž. A. Spasojević i Z. V. Popović: Elektrotehnički i elektronski materijali, *Promezzia*, Beograd 1995.
- [10] S. Lazarev, M. Pantić, S. Jaćimovski and J. Šetrajić: Phonons in Thin Layered Structures, *prihvaćeno za Zbornik SFKM* (1998).
- [11] D. S. Mitrinović: Uvod u specijalne funkcije, *Građevinska knjiga*, Beograd 1972.
- [12] D. Heermann: Computer Simulation Methods in Theoretical Physics, *Springer-Verlag*, Berlin 1986.
- [13] S. Koonin: Computational Physics, *The Benjamin/Cummings PC*, Menlo Park 1986.
- [14] K. Binder: Monte Carlo Methods in Statistical Physics, *Springer*, Berlin 1986.

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: *Robert Firstenberg, br.dos. 301/93*  
AU
- Mentor: *Dr Jovan Šetrajčić, redovni profesor, PMF, Novi Sad*  
MN
- Naslov rada: *Simulacija fononskih spektara u tankim kristalnim filmovima*  
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: *(7/30/14/1/11/0/0)*  
FO
- Naučna oblast: *Fizika*  
NO
- Naučna disciplina: *Fizika čvrstog stanja*  
ND
- Predmetna odrednica/ključne reči: *kristalni filmovi, fononi, simulacija*  
PO
- Čuva se: *Biblioteka Instituta za fiziku, PMF, Novi Sad*
- Izvod: *U radu je primenjen metod molekularne dinamike za simulaciju fonona u tankim kristalnim filmovima. Fononski spektri su dobijeni Furijeovom analizom pomeraja atoma u kristalnom filmu. Opisani postupak je primenjen za određivanje fononskih spektara nehomogenih kristalnih filmova. Na osnovu dobijenih rezultata, analizirana je zavisnost fononskog spektra od stepena nehomogenosti filma*  
IZ
- Datum prihvatanja teme od strane Veća: *10.02.1998.*  
DP
- Datum odbrane:  
DO
- Članovi komisije:  
Predsednik:  
*Dr Ljiljana Mašković,*  
*vanr. profesor, PMF, Novi Sad*  
Članovi:  
*Dr Jovan Šetrajčić,*  
*redovni profesor, PMF, Novi Sad*  
*Dr Željko Škrbić,*  
*vanr. profesor, PMF, Novi Sad*  
*Dr Agneš Kapor,*  
*redovni profesor, PMF, Novi Sad*  
KO