

Примљено:			22. окт. 1996.
Организација:	Физика	Садржано:	Вредност
0603	9/270		

UNIVERZITET U NOVOM SADU  
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET  
INSTITUT ZA FIZIKU

Sladjana Stojković

# ELEKTRONSKI SPEKTRI U KRISTALNIM FILMOVIMA

- ДИПЛОМСКИ РАД -

MENTOR: PROF. DR JOVAN ŠETRAJČIĆ

NOVI SAD, 1996.

## SADRŽAJ

	Strana
1. UVOD .....	3
2. GRINOVE FUNKCIJE U FIZICI ČVRSTOG STANJA .....	4
3. ELEKTRONI U NEOGRANIČENIM KRISTALIMA .....	8
3.1. Elektroni u periodičnom potencijalu .....	9
3.2. Elektronski spektri u kristalima .....	11
4. ELEKTRONI U FILM-STRUKTURAMA .....	13
5. ZAKLJUČAK .....	21
6. LITERATURA .....	22

## 1. U V O D

Predmet ovog rada je ispitivanje elektronskih spektara u kristalnim film-strukturama i njihovo poredjenje sa istim u idealnim, beskonačnim strukturama. U teoriji kondenzovane materije se najčešće analiziraju strukture koje su prostorno homogene i poseduju osobinu translacione invarijantnosti. Međutim, u praksi idealno čiste strukture ne postoje. Pored toga, kristali poseduju granične površine na kojima dolazi do specifičnih efekata i fizičkih fenomena, a oni se ne mogu direktno objasniti metodama teorije idealnih struktura. Postojanje graničnih površina, pored uticaja nečistoća (primesa, defekata, vakancija i sl.), kod ovih struktura dovodi do narušenja translacione simetrije. Upravo zbog toga je značajna analiza elektronskih stanja u realnijim kristalnim strukturama, kao što su npr. filmovi.

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

U većem broju diplomskih radova, novijeg datuma, ispitani je uticaj fononskog podsistema na fizičke karakteristike kristalne strukture, međutim od velikog značaja je i ispitivanje sledećeg fundamentalnog podsistema - elektrona, jer su upravo oni nosioci svih transportnih fizičkih procesa. U ovom radu istraženi su uticaji graničnih parametara na energetski spektar i moguća stanja elektrona (promene u zakonu disperzije).

Prilikom gore pomenute analize korišćen je metod Grinovih funkcija, koji predstavlja jedan u nizu metoda pomoći kojih se ovaj problem može tretirati. Pored tog metoda postoji i mnogi drugi kao što su: metod Hajzenbergovih jednačina kretanja, metod malih perturbacija, metod talasnih funkcija i sl. Primenjeni metod je odabran zbog pogodnosti koje nam nudi definicija polova Grinovih funkcija<sup>1</sup>.

Odabranom metodom najpre su vršena istraživanja na idealnim beskonačnim strukturama, a zatim na kristalnim filmovima i to zbog toga da bi se na osnovu tih rezultata uočile najbitnije razlike za film strukturu.

---

<sup>1</sup>Realni delovi polova Grinovih funkcija su proporcionalni energijama elementarnih eksicitacija (pobudjenja) koje se javljaju u sistemu (odakle dobijamo njihov zakon disperzije), a imaginarni - recipročnim vrednostima vremena života tih eksicitacija.

## 2. GRINOVE FUNKCIJE U FIZICI ČVRSTOG STANJA

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

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

$$\langle \hat{A}(x, t) \rangle_t = \text{Sp} \langle \hat{A}(x, t) \hat{\varrho}_t \rangle \quad (2.1)$$

gde je:

$$\hat{\varrho}_t = e^{\frac{H_0 t}{i\hbar}} \hat{S}(t, t_o) e^{-\frac{H_0 t}{i\hbar}} \quad (2.2)$$

$\hat{\varrho}_t$  - neravnotežni statistički operator.  $\varrho_o$  - ravnotežni statistički operator. Za izračunavanje neravnotežnih srednjih vrednosti najpogodnije je koristiti ravnotežni operator velikog kanoničkog ansambla:

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

jer je velika kanonička raspodela najopštija (ona uključuje zakone održanja srednje energije i srednjeg broja čestica). Ako se (2.1) zameni u (2.2) i izvrše dve ciklične permutacije operatora, dobija se:

$$\text{Sp} \langle \hat{A}(x, t) \hat{\varrho}_t \rangle = \text{Sp} (\hat{S}^{-1}(t, t_o) e^{-\frac{H_0 t}{i\hbar}} \hat{A}(x, t) e^{\frac{H_0 t}{i\hbar}} \hat{S}(t, t_o) \hat{\varrho}_o)$$

tj.:

$$\langle \hat{A}(x, t) \rangle_t = \langle \hat{S}^{-1}(t, t_o) \hat{A}(x, t) \hat{S}(t, t_o) \rangle_0 \quad (2.3)$$

gde je

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

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

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

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

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

tada je

$$\langle \hat{A}(x, t) \rangle_t = \langle \hat{A}(x, t) \rangle_0 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \langle \hat{A}(x, t) \hat{T} \hat{W}(t') - \hat{T} \hat{W}(t') \hat{A}(x, t) \rangle_0 \quad (2.4)$$

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

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

Zbog toga izraz (2.4) prelazi u:

$$\langle \hat{A}(x, t) \rangle_t = \langle \hat{A}(x, t) \rangle_0 + L(t, t_0) \quad (2.5)$$

gde je:

$$L(t, t_0) = \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \Theta(t - t') \langle \hat{A}(x, t) \hat{W}(t') - \hat{W}(t') \hat{A}(x, t) \rangle_0 \quad (2.6)$$

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

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

$$\hat{H}_{int}(t') = \int dx' \hat{B}(x', t') \varepsilon(x', t') \quad (2.7)$$

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

Kako je:

$$\hat{W}(t) = \exp\left(-\frac{H_0 t}{i\hbar}\right) \hat{H}_{int}(t) \exp\left(\frac{H_0 t}{i\hbar}\right) \quad (2.8)$$

na osnovu (2.7) i (2.8) operator  $W(t')$  biće:

$$\hat{W}(t') = \int dx' \hat{B}(x', t') \varepsilon(x', t') \quad (2.9)$$

gde je

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

Šredingerov operator  $\hat{B}$  napisan u reprezentaciji interakcije.

Zamenom (2.9) u (2.6) dobija se:

$$L(t, t_0) = \frac{1}{i\hbar} \int dx' \int_{t_0}^t dt' \varepsilon(x', t') G(x, x'; t, t') \quad (2.10)$$

gde je veličina:

$$G(x, x'; t, t') = \Theta(t - t') \langle \hat{A}(x, t) \hat{B}(x', t') - \hat{B}(x', t') \hat{A}(x, t) \rangle_0 \quad (2.11)$$

i naziva se dvovremenska temperaturska retardovana funkcija Grina (GF). Ona zavisi od  $6N + 2$  promenljive (dva puta po tri prostorne i dve vremenske). Ako je prostor homogen (bez defekata, primesa itd) onda GF, kao njegova fizička karakteristika ne zavisi od konfiguracionih koordinata  $x$  i  $x'$  ponaosob, već od njihove razlike  $x - x'$ , pa se broj promenljivih svodi na  $3N + 2$ . Ako originalni operatori ne zavise eksplisitno od vremena, tj.  $\hat{A}(x, t) \equiv \hat{A}(x)$  i  $\hat{B}(x, t) \equiv \hat{B}(x)$  tada GF ne zavisi od vremenskih koordinata  $t$  i  $t'$  ponaosob, već od njihove razlike  $t - t'$  i ukupan broj promenljivih se svodi na  $3N + 1$ . U tom slučaju GF (2.11) prelazi u:

$$\begin{aligned} G(x, x'; t, t') &\longrightarrow G(x - x', t - t') = \\ &= \Theta(t - t') [\mathcal{J}_{AB}(x - x', t - t') - \mathcal{J}_{BA}(x - x', t - t')] \end{aligned} \quad (2.12)$$

Ovde su uvedene korelacione funkcije:

$$\mathcal{J}_{AB}(x - x', t - t') = \langle \hat{A}(x, t) \hat{B}(x', t') \rangle_0; \quad \mathcal{J}_{BA}(x - x', t - t') = \langle \hat{B}(x', t') \hat{A}(x, t) \rangle_0 \quad (2.13)$$

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

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

$$G_{\vec{n}\vec{m}}(t) \equiv \langle \langle \hat{A}_{\vec{n}}(t) \mid \hat{B}_{\vec{m}}(0) \rangle \rangle = \Theta(t) \langle [\hat{A}_{\vec{n}}(t), \hat{B}_{\vec{m}}(0)] \rangle_0 \quad (2.14)$$

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

$$\frac{d}{dt} G_{\vec{n}\vec{m}}(t) = \frac{d}{dt} \Theta(t) \langle [\hat{A}_{\vec{n}}(t), \hat{B}_{\vec{m}}(0)] \rangle_0 + \Theta(t) \langle \left[ \frac{d\hat{A}_{\vec{n}}(t)}{dt}, \hat{B}_{\vec{m}}(0) \right] \rangle_0 \quad (2.15)$$

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

$$i\hbar \frac{d}{dt} G_{\vec{n}\vec{m}}(t) = i\hbar \delta(t) C_{\vec{n}\vec{m}} + \langle \langle [\hat{A}_{\vec{n}}(t), H(t)] \mid \hat{B}_{\vec{m}}(0) \rangle \rangle \quad (2.16)$$

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

Primenom Furijeove transformacije:

$$G_{\vec{n}\vec{m}}(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega t} G_{\vec{n}\vec{m}}(\omega) \quad (2.17)$$

jednačina (2.16) prelazi u

$$\hbar \omega G_{\vec{n}\vec{m}}(\omega) = \frac{i\hbar}{2\pi} C_{\vec{n}\vec{m}} + \langle \langle [\hat{A}_{\vec{n}}(t), H(t)] \mid \hat{B}_{\vec{m}}(0) \rangle \rangle_\omega \quad (2.18)$$

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

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

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

$$\lim_{\delta \rightarrow +0} [G_{\vec{n}\vec{m}}(\omega + i\delta) - G_{\vec{n}\vec{m}}(\omega - i\delta)] = (e^{\hbar\omega/\theta} - 1) \mathcal{J}_{BA}^{\vec{n}\vec{m}}(\omega) \quad (2.19)$$

gde je  $\mathcal{J}_{BA}^{\vec{n}\vec{m}}(\omega)$  Furijeov transform korelace funkcije  $\mathcal{J}_{BA}^{\vec{n}\vec{m}}(t)$ . Za  $t = 0$  korelace funkcije (2.13) zapravo predstavljaju srednje vrednosti proizvoda odgovarajućih operatora.

### 3. ELEKTRONI U KRISTALIMA

Veliki broj važnih fizičkih osobina možemo razumeti polazeći od modela slobodnih elektrona po kome se najslabije vezani elektroni atoma kreću slobodno po zapremini metala. Valentni elektroni postaju provodnici elektriciteta i nazivaju se provodni elektroni. Sile izmedju provodnih elektrona i jona se zanemaruju, tj. smatra se da se provodni elektroni mogu kretati svuda u unutrašnjosti uzorka. Totalna energija je jednaka kinetičkoj, što znači da se potencijalna ne uzima u obzir.

Poznato je da je stvarna raspodela provodnih elektrona rezultat uticaja jakog električnog potencijala jona. Upotrebljivost ovog modela zavisi od kinetičkih svojstava provodnih elektrona. Postavke ovog modela bile su date mnogo pre otkrića kvantne mehanike. Klasična teorija je imala nekoliko uspeha ali i nedostataka. U uspehe spadaju izvodjenje Omovog zakona ( $j = \sigma \vec{E}$ ) i izvodjenje veze izmedju električne i toplotne provodnosti. Međutim, totalni neuspeh je doživela u objašnjenju toplotnog kapaciteta i paramagnetne susceptibilnosti. Zatim, pomoću klasične teorije ne može se objasniti postojanje dugog slobodnog puta elektrona. Provodni elektron može da se kreće u metalu po pravoj putanji dužine većeg broja medjuatomskih rastojanja a da se ne sudari sa drugim elektronima ili atomskim ostacima, odnosno, provodni elektroni se u tom smislu ponašaju kao gas neinteragujućih čestica. Razlozi za to su sledeći. Slobodan elektron ne skreće pod uticajem jona uredjenih u periodičnu rešetku, jer se talasi materije prostiru slobodno u periodičnim strukturama. Provodni elektroni se retko sudare sa drugim elektronima što je posledica Paulijevog principa isključenja.

Elektroni u metalima se mogu uz grublje aproksimacije posmatrati i kao Fermijev gas slobodnih elektrona (gas slobodnih neinteragujućih elektrona podvrgnutih Paulijevom principu).

Tada su energije zadate kinetičkom energijom translacije:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} , \quad (3.1)$$

gde je  $\vec{k}$  - talasni vektor, a  $m$  - masa elektrona. U slučaju:

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

( $\mu$  - hemijski potencijal) kvantni efekti postaju dominantniji (ako je toplotna energija znatno niža od hemijskog potencijala:  $\mu \gg kT$ ). Čestice se pokoravaju Paulijevom principu. Na absolutnoj nuli one popunjavaju redom najniža kvantna stanja. Takav

gas nazivamo potpuno degenerisanim fermionskim gasom. Značaj Paulijevog principa se manifestuje u izgledu funkcije raspodele osnovnog stanja fermiona. Specijalizirajući Fermi-Dirakovu funkciju:

$$f = \left[ \exp\left(\frac{E - \mu}{kT} + 1\right) \right]^{-1}; \quad \text{na } T = 0, \quad f = \begin{cases} 1 & E \leq \mu_0 \\ 0 & E > \mu_0 \end{cases} \quad (3.2)$$

( $\mu_0$  je vrednost hemijskog potencijala na apsolutnoj nuli). Na  $T = 0$  sva stanja sa energijama manjim od  $\mu_0$  su popunjena, a viša energetska stanja su prazna, pa je  $\mu_0$  jednak graničnoj energiji degenerisanog gasa. Zauzeta stanja na  $T = 0$  mogu se prikazati sferom u prostoru talasnog vektora, koja se zove Fermijeva sfera. Njen radijus je Fermijev talasni vektor  $\vec{k}_F$ , koji određuje graničnu - Fermijevu energiju:

$$\mu_0 = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$$

Temperatura pridružena ovoj energiji je temperatura degeneracije:  $T_F = \mu_0/k_B$ . Fermionski gas je degenerisan u području gde važi  $T \ll T_F$ . Kako je ukupna energija osnovnog stanja fermionskog gasa:  $U_0 = \int f(E) dN = \frac{3}{5}N\mu_0$  srednja energija biće:  $E_0 = (U_0/N) = (3/5)\mu_0$ , gde je  $N = \sum_i N_i$  ukupan broj čestica gasa.

### 3.1 Elektroni u periodičnom potencijalu

U strogom smislu, elektroni i joni u kristalu čine jedan kvantni sistem, čije rešenje treba naći. Ovakvo postavljanje problema je suviše komplikovano, pa treba potražiti jednostavnije prilaze. Najpre, možemo elektrone zamisliti kao nezavisne čestice koje se kreću pod ukupnim uticajem svih sila. Ako zanemarimo nepravilnosti u gradji kristalne rešetke i oscilovanja atoma oko ravnotežnih položaja u rešetki, tada se svaki elektron kreće u potencijalu koji je periodičan sa periodom kristalne celije. Neka su ivice elementarne celije definisane vektorima  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ , onda su osnovne tačke rešetke date tripletom celih brojeva:

$$\vec{n} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3 \quad (3.3)$$

S obzirom na ovo i potencijal je periodičan:

$$U(\vec{r}) \equiv U(\vec{r} + n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3) \quad (3.4)$$

U takvom periodičnom potencijalu talasne funkcije elektrona imaju neka opšta svojstva koja proizilaze neposredno iz Šredingerove jednačine:

$$H u = E u \quad (3.5)$$

pri čemu su:

$$H(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{r}) \quad (3.6)$$

$$u_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} v_{\vec{k}}(\vec{r}) ; \quad v_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{n}) = v_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (3.7)$$

To je Blohova teorema iz 1928. godine. Prvi faktor u ovoj jednačini proizilazi iz konstantnog potencijala i u mnogome opisuje „slobodno kretanje elektrona”; drugi faktor je periodična funkcija rešetke i određuje vezivanje elektrona za kristalnu rešetku.

Uvrštavanjem (3.6) i (3.7) u (3.5), dobija se:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla + i\vec{k})^2 v_{\vec{k}} + U v_{\vec{k}} = E(\vec{k}) v_{\vec{k}} \quad (3.8)$$

Funkcija  $v_{\vec{k}}$  mora biti ista na suprotnim stranicama celije, što su granični uslovi jednačine. Za neke energije talasni vektor  $\vec{k}$  postaje kompleksan. Takve vrednosti se isključuju iz energetskog spektra jer, u protivnom, gustina verovatnoće ne bi imala svojstvo translacione invarijantnosti. Suprotno od energije slobodnog elektrona, energija elektrona u periodičnom potencijalu ne može da se menja kontinualno. Potpuni spektar, dakle, zavisi od celog broja  $l$  i parametra  $\vec{k}$ , što može da se predstavi kao niz energetskih zona  $E_l(\vec{k})$ . Za svaki broj  $l$  postoji kontinuum energija određene širine, čije zone mogu da budu razmaknute ili da se prekrivaju.

Posebno je interesantna primitivna kubna rešetka koja ima medjusobno normalne ose. Jedinični vektori u smeru osa  $x$ ,  $y$ ,  $z$  redom, označeni su kao:

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

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

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

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

$$-\frac{\pi}{a} < k_i < \frac{\pi}{a}; \quad i = x, y, z. \quad (3.9)$$

Energija elektrona u periodičnom potencijalu se onda može izraziti kao:

$$E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (3.10)$$

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

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_y} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_z} \\ \frac{\partial^2 E}{\partial k_y \partial k_x} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_y^2} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_y \partial k_z} \\ \frac{\partial^2 E}{\partial k_z \partial k_x} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_z \partial k_y} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_z^2} \end{pmatrix} \quad (3.11)$$

### 3.2 Elektronski spektri u kristalima

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

$$H = \sum_{\vec{n}} \Delta_{\vec{n}} a_{\vec{n}}^+ a_{\vec{n}} - \sum_{\vec{n}, \vec{m}} W_{\vec{n}, \vec{m}} a_{\vec{n}}^+ a_{\vec{m}}, \quad (3.12)$$

gde su  $a_{\vec{n}}^+$  i  $a_{\vec{n}}$  - kreacioni i anihilacioni operatori elektrona na čvoru  $\vec{n}$  reštke. Veličina  $\Delta_{\vec{n}}$  - predstavlja energiju elektrona lokalizovanog na čvoru  $\vec{n}$ , a veličine  $W_{\vec{n}, \vec{m}}$  - su matrični elementi elektronskog transfera sa čvora  $\vec{n}$  na čvor  $\vec{m}$ . Ovde je pretpostavljeno da je broj elektrona po atomu relativno mali (jedan elektron po atomu) tako da se Kulonova interakcija elektrona može zanemariti. U tom slučaju, lako se pokazuje da je hamiltonijan (3.12) ekvivalentan hamiltonijanu elektronskog gasa u aproksimaciji efektivne mase:

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

Iz translacione invarijantnosti posmatranog idealnog kristala sledi periodičnost hamiltonijana (3.12) koja ima za posledicu da su:

$$\Delta_{\vec{n}} = \Delta, \quad W_{\vec{n}, \vec{m}} = W_{\vec{m}, \vec{n}} \equiv W; \quad \forall (\vec{n}, \vec{m}) \quad (3.13)$$

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

$$\begin{aligned} H = & \Delta \sum_{n_x n_y n_z} a_{n_x n_y n_z}^+ a_{n_x n_y n_z} - W \sum_{n_x n_y n_z} a_{n_x n_y n_z}^+ (a_{n_x+1, n_y n_z} + a_{n_x-1, n_y n_z} + \\ & + a_{n_x n_y+1, n_z} + a_{n_x n_y-1, n_z} + a_{n_x n_y n_z+1} + a_{n_x n_y n_z-1}) \end{aligned} \quad (3.14)$$

Svojstva posmatranog elektronskog sistema analiziraćemo pomoću antikomutatorske GF

$$G_{\vec{n}, \vec{m}}(t) = \Theta(t) \langle \{a_{\vec{n}}(t), a_{\vec{m}}^+(0)\} \rangle \quad (3.15)$$

koja zadovoljava jednačinu kretanja:

$$i\hbar \frac{d}{dt} G_{\vec{n}, \vec{m}}(t) = i\hbar \delta_{\vec{n}, \vec{m}} \delta(t) + \Theta(t) \langle \{[a_{\vec{n}}, H], a_{\vec{m}}^+\} \rangle \quad (3.16)$$

Za izračunavanje komutatora  $[a_{\vec{n}}, H]$  koristićemo standardne fermionske komutatorske relacije:  $\{a_{\vec{n}}, a_{\vec{m}}^+\} = \delta_{\vec{n}, \vec{m}}$ .  $\{a_{\vec{n}}, a_{\vec{m}}\} = \{a_{\vec{n}}^+, a_{\vec{m}}^+\} = 0$ . Ako se izračunate vrednosti odgovarajućih komutatora zamene u jednačinu kretanja (3.16) dobija se:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} G_{\vec{n}, \vec{m}}(t) = & i\hbar \delta_{\vec{n}, \vec{m}} \delta(t) + \Delta G_{\vec{n}, \vec{m}}(t) - \\ & - W [G_{n_x+1, n_y n_z; \vec{m}}(t) + G_{n_x-1, n_y n_z; \vec{m}}(t) + G_{n_x n_y+1, n_z; \vec{m}}(t) + \\ & + G_{n_x n_y-1, n_z; \vec{m}}(t) + G_{n_x n_y n_z+1; \vec{m}}(t) + G_{n_x n_y n_z-1; \vec{m}}(t)] \end{aligned} \quad (3.17)$$

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

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

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

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

i izraz (3.18) diferencira po t:

$$\frac{d}{dt} G_{\vec{n},\vec{m}}(t) = -i \frac{\omega}{N} \sum_{\vec{k}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega G_{\vec{k}}(\omega) e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})-i\omega t} \quad (3.19)$$

a zatim sve to zameni u (3.17) dobija se:

$$[\hbar\omega - \Delta + 2W (\cos ak_x + \cos ak_y + \cos ak_z)] G_{\vec{k}}(\omega) = \frac{i\hbar}{2\pi}, \quad (3.20)$$

a odatle:

$$G_{\vec{k}}(\omega) = \frac{i}{2\pi} \frac{1}{\omega - \omega_{\vec{k}}} \equiv \frac{i\hbar}{2\pi} \frac{1}{E - E_{\vec{k}}} \quad (3.21)$$

gde

$$E_{\vec{k}} = \hbar \omega_{\vec{k}} = \Delta - 2W (\cos ak_x + \cos ak_y + \cos ak_z) \quad (3.22)$$

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

$$E_{\vec{k}} = 4W \left( \sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y}{2} + \sin^2 \frac{ak_z}{2} \right) \quad (3.23)$$

Poslednji izraz možemo napisati i u sledećem obliku:

$$\mathcal{E}_{\vec{k}} \equiv \frac{E_{\vec{k}}}{4W} = \mathcal{F}_{k_x k_y} + \mathcal{G}_{k_z}. \quad (3.24)$$

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

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

## 4. ELEKTRONI U TANKIM FILMOVIMA

Hamiltonijan vezanih elektrona u tankim kristalnim filmovima možemo formirati polazeći od „balkovskog“ hamiltonijana (3.12), odnosno (3.14) koji u aproksimaciji najbližih suseda ima oblik:

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{n_x n_y n_z} \Delta_{n_x n_y n_z} a_{n_x n_y n_z}^+ a_{n_x n_y n_z} - \sum_{n_x n_y n_z} a_{n_x n_y n_z}^+ \times \\
 & \times \left( W_{n_x n_y n_z; n_x+1, n_y, n_z} a_{n_x+1, n_y, n_z} + W_{n_x n_y n_z; n_x-1, n_y, n_z} a_{n_x-1, n_y, n_z} + \right. \\
 & + W_{n_x n_y n_z; n_x n_y+1, n_z} a_{n_x n_y+1, n_z} + W_{n_x n_y n_z; n_x n_y-1, n_z} a_{n_x n_y-1, n_z} + \\
 & \left. + W_{n_x n_y n_z; n_x n_y n_z+1} a_{n_x n_y n_z+1} + W_{n_x n_y n_z; n_x n_y n_z-1} a_{n_x n_y n_z-1} \right)
 \end{aligned} \quad (4.1)$$

Pošto su granične površine filma uzete normalno na  $z$  - pravac, indeks sloja  $n_z$  u (4.1) - uzima vrednosti  $n_z = 0, 1, 2, \dots, N_z$ , gde je  $N_z \in [2, 20]$  kod ultratankih filmova. Indeksi  $n_x$  i  $n_y$ , koji određuju položaj atoma u svakom sloju mogu imati proizvoljne celobrojne vrednosti (praktično, od  $-\infty$ , do  $+\infty$ ).

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

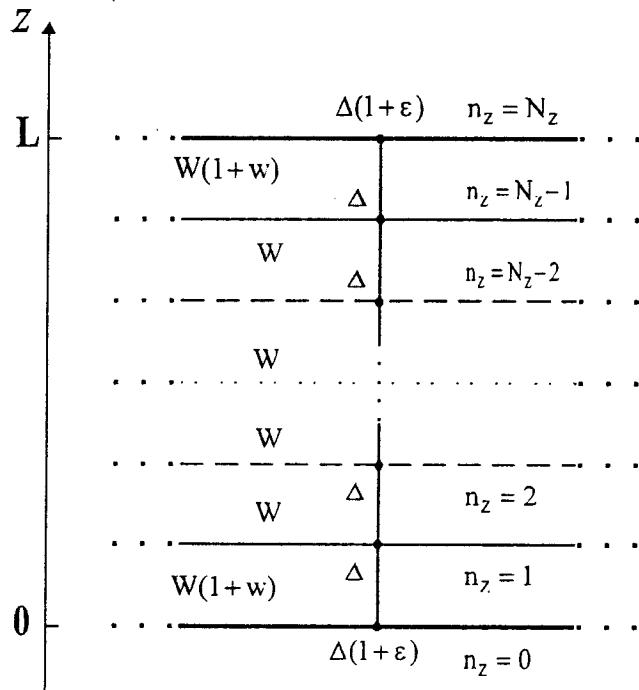
Zbog izmenjenih uslova na granicama filma, uzećemo da je:

$$\Delta_{n_x n_y 0} = \Delta_{n_x n_y N_z} \equiv \Delta (1 + \varepsilon) \quad (4.2)$$

gde je  $\Delta$  - energija elektrona na čvoru kod beskonačnog kristala; površinski parametar  $\varepsilon$  (koji može biti  $> 0$  ili  $< 0$ ) izražava relativnu promenu ove energije na granicama filma. Matrične elemente elektronskog preskoka sa sloja na sloj, možemo izraziti:

$$\begin{aligned}
 W_{n_x n_y n_z; n_x \pm 1, n_y, n_z} &= W_{n_x n_y n_z; n_x n_y \pm 1, n_z} \equiv W \\
 W_{n_x n_y 0; n_x n_y 1} &= W_{n_x n_y N_z - 1; n_x n_y N_z} = W(1 + w) \\
 W_{n_x n_y 0; n_x n_y - 1} &= W_{n_x n_y N_z; n_x n_y N_z + 1} = 0
 \end{aligned} \quad (4.3)$$

gde je  $W$  - konstanta elektronskog transfera idealnog kristala. Drugi površinski parametar  $w$  ( $w > 0$  ili  $w < 0$ ) opisuje relativnu promenu matričnog elementa elektronskog transfera ( $W$ ) izmedju graničnih i njima susednih slojeva filma.

Slika 4.1: Presek modela kristalnog filma u  $X(Y)Z$  - ravni

Elektronski hamiltonijan tankih kristalnih filmova možemo sada napisati u obliku:

$$H = H_z + H_p ,$$

$$\begin{aligned} H_z &= \sum_{m_x m_y} \sum_{m_z=1}^{N_z-1} a_{m_x m_y m_z}^+ \left[ \Delta a_{m_x m_y m_z} - W (a_{m_x+1, m_y m_z} + a_{m_x-1, m_y m_z} + \right. \\ &\quad \left. + a_{m_x m_y+1, m_z} + a_{m_x m_y-1, m_z} + a_{m_x m_y m_z+1} + a_{m_x m_y m_z-1}) \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} H_p &= \sum_{m_x m_y} \left\{ a_{m_x m_y 0}^+ [(1+\epsilon) \Delta a_{m_x m_y 0} - W(1+w) a_{m_x m_y 1}] + \right. \\ &\quad + a_{m_x m_y N_z}^+ [(1+\epsilon) \Delta a_{m_x m_y N_z} - W(1+w) a_{m_x m_y N_z-1}] - \\ &\quad - Wa_{m_x m_y 0}^+ (a_{m_x+1, m_y 0} + a_{m_x-1, m_y 0} + a_{m_x m_y+1, 0} + a_{m_x m_y-1, 0}) - \\ &\quad \left. - Wa_{m_x m_y N_z}^+ (a_{m_x+1, m_y N_z} + a_{m_x-1, m_y N_z} + a_{m_x m_y+1, N_z} + a_{m_x m_y-1, N_z}) \right\} \end{aligned} \quad (4.4)$$

Pomoću tako definisanog hamiltonijana, najpre ćemo izračunati jednočestične antikomutatorske GF (3.15):

$$G_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z}(t) = \Theta(t) \langle \{a_{n_x n_y n_z}(t), a_{m_x m_y m_z}^+(0)\} \rangle \quad (4.5)$$

koje određuju ravnotežna svojstva elektrona u tankim kristalnim filmovima.

Elektronske GF se mogu izračunati mikroteorijskom procedurom na sličan način kao što je uradjeno u glavi 3. Potrebno je pre svega formirati jednačine kretanja diferenciranjem prethodnog izraza po vremenu:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} G_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z}(t) &= i\hbar \delta(t) \delta_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z} + \\ &+ \Theta(t) \langle \{ [a_{n_x n_y n_z}(t), H], a_{m_x m_y m_z}^+(0) \} \rangle, \end{aligned} \quad (4.6)$$

i izračunati odgovarajuće komutatore, nakon čega dobijamo:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} G_{\vec{n}, \vec{m}}(t) &= i\hbar \delta_{\vec{n} \vec{m}} \delta(t) + \Delta G_{\vec{n}, \vec{m}}(t) - \\ &- W [G_{n_x+1, n_y n_z; \vec{m}}(t) + G_{n_x-1, n_y n_z; \vec{m}}(t) + G_{n_x n_y+1, n_z; \vec{m}}(t) + \\ &+ G_{n_x n_y-1, n_z; \vec{m}}(t) + G_{n_x n_y n_z+1; \vec{m}}(t) + G_{n_x n_y n_z-1; \vec{m}}(t)]. \end{aligned} \quad (4.7)$$

Uvodjenjem vremenske i delimične prostorne Furije-transformacije za GF,

$$G_{n_x n_y n_z; \vec{m}}(t) = \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i[k_x a_x(n_x - m_x) + k_y a_y(n_y - m_y)]} e^{-i\omega t} G_{n_z; m_z}(k_x, k_y; \omega) \quad (4.8)$$

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

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

jednačina (4.7) prelazi u

$$\begin{aligned} [\hbar\omega - \Delta + 2W(\cos ak_x + \cos ak_y)] G_{n_z; m_z}(k_x k_y; \omega) + \\ + W [G_{n_z+1; m_z}(k_x k_y; \omega) + G_{n_z-1; m_z}(k_x k_y; \omega)] = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{n_z m_z} \end{aligned} \quad (4.9)$$

koja važi za slučaj  $1 \leq n_z \leq N_z - 1$ , a za  $n_z = 0$ :

$$\begin{aligned} [\hbar\omega - (1 + \varepsilon)\Delta + 2W(\cos ak_x + \cos ak_y)] G_{0; m_z}(k_x k_y; \omega) + \\ + (1 + w) W G_{1; m_z}(k_x k_y; \omega) = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{0, m_z} \end{aligned} \quad (4.10)$$

Za  $n_z = 1$ , jednačina kretanja (4.7) prelazi u:

$$\begin{aligned} [\hbar\omega - \Delta + 2W(\cos ak_x + \cos ak_y)] G_{1; m_z}(k_x k_y; \omega) + \\ + W [G_{2; m_z}(k_x k_y; \omega) + (1 + w) G_{0; m_z}(k_x k_y; \omega)] = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{1, m_z}, \end{aligned} \quad (4.11)$$

a za  $n_z = N_z - 1$ :

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - \Delta + 2W(\cos ak_x + \cos ak_y)] G_{N_z-1;m_z}(k_x k_y; \omega) + \\ & + W [G_{N_z-2;m_z}(k_x k_y; \omega) + (1+w)G_{N_z;m_z}(k_x k_y; \omega)] = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{N_z-1,m_z} \end{aligned} \quad (4.12)$$

Konačno za  $n_z = N_z$ , dobija se:

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - (1+\varepsilon)\Delta + 2W(\cos ak_x + \cos ak_y)] G_{N_z;m_z}(k_x k_y; \omega) + \\ & + (1+w)WG_{N_z-1;m_z}(k_x k_y; \omega) = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{N_z,m_z} \end{aligned} \quad (4.13)$$

Sada možemo formirati sistem od jednačina (4.9-4.13). Svaku od ovih jednačina delimo sa  $W$ , pri čemu uvodimo oznake:

$$\begin{aligned} \varrho &= \frac{\hbar\omega}{W} - \frac{\Delta}{W} + 2(\cos ak_x + \cos ak_y); \\ G_{n_z;m_z}(k_x, k_y; \omega) &\equiv G_{n_z,m_z}; \quad \mathcal{K} = \frac{i\hbar}{2\pi W} \end{aligned} \quad (4.14)$$

Pomenuti sistem jednačina ima oblik:

$$\begin{aligned} (\varrho - \varepsilon) G_{0,m_z} + (1+w) G_{1,m_z} &= \mathcal{K} \delta_{0,m_z} \\ (1+w) G_{0,m_z} + \varrho G_{1,m_z} + G_{2,m_z} &= \mathcal{K} \delta_{1,m_z} \\ G_{1,m_z} + \varrho G_{2,m_z} + G_{3,m_z} &= \mathcal{K} \delta_{2,m_z} \\ \\ G_{n_z-1,m_z} + \varrho G_{n_z,m_z} + G_{n_z+1,m_z} &= \mathcal{K} \delta_{n_z,m_z} \end{aligned} \quad (4.15)$$

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

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

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

U cilju osnovnog zadatka ovog istraživanja, a to je određivanje elektronskih energija, potrebni su nam polovi GF koji se dobijaju kada iste teže beskonačnosti, što znači da mora biti:

$$D_{N_z+1} \equiv 0 \quad (4.16)$$

$$D_{N_z+1}(\varrho) = \begin{vmatrix} \varrho - \varepsilon & 1 + w & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 + w & \varrho & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \varrho & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \ddots & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & \varrho & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & \varrho & 1 + w \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 + w & \varrho - \varepsilon \end{vmatrix}_{N_z+1} \quad (4.17)$$

$D_{N_z+1}(\varrho)$  predstavlja determinantu sistema i može se izraziti pomoću karakterističnih Čebiševljevih polinoma ( $C$ ):

$$\begin{aligned} D_{N_z+1}(\varrho) = & [\varrho(\varrho - \varepsilon)^2 + 2(1 + w)^2(\varrho - \varepsilon)(1 - \varrho^2) + \\ & + (1 + w)^4 \varrho(\varrho^2 - 2)] C_{N_z}(\varrho) - \\ & - \left\{ [(\varrho - \varepsilon) - \varrho(1 + w)^2]^2 - (1 + w)^4 \right\} C_{N_z+1}(\varrho) \end{aligned} \quad (4.18)$$

Uslov (4.16), u opštem slučaju, može se rešiti numerički za zadate parametre  $\varepsilon, w$  i  $N_z$ , ali i analitički kada je:  $\varepsilon = w = 0$ . Drugi slučaj odgovara film-strukturi koja je „isečena“ iz beskonačne. Tada je:

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

Iz uslova  $C_{N_z+1} \equiv 0$ , dobija se:

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

Na osnovu ovoga i jednačine (4.14) nalazimo:

$$\hbar \omega_\mu = \Delta - 2W (\cos ak_x + \cos ak_y - \cos \zeta_\mu) \quad (4.19)$$

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

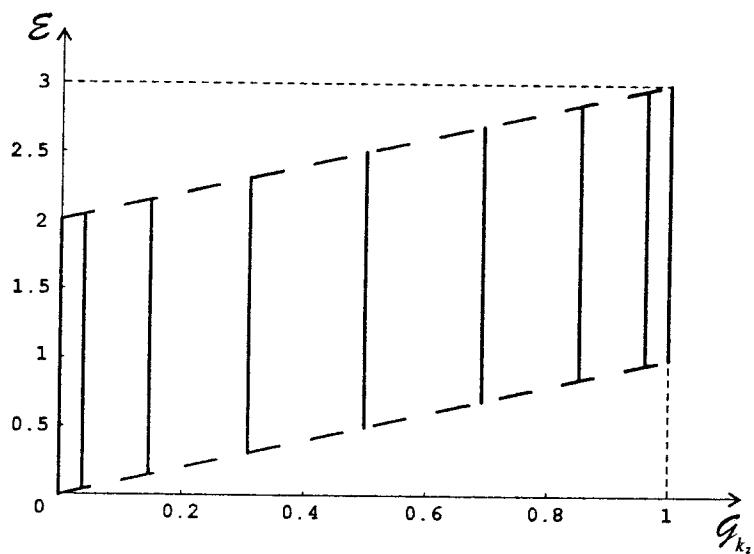
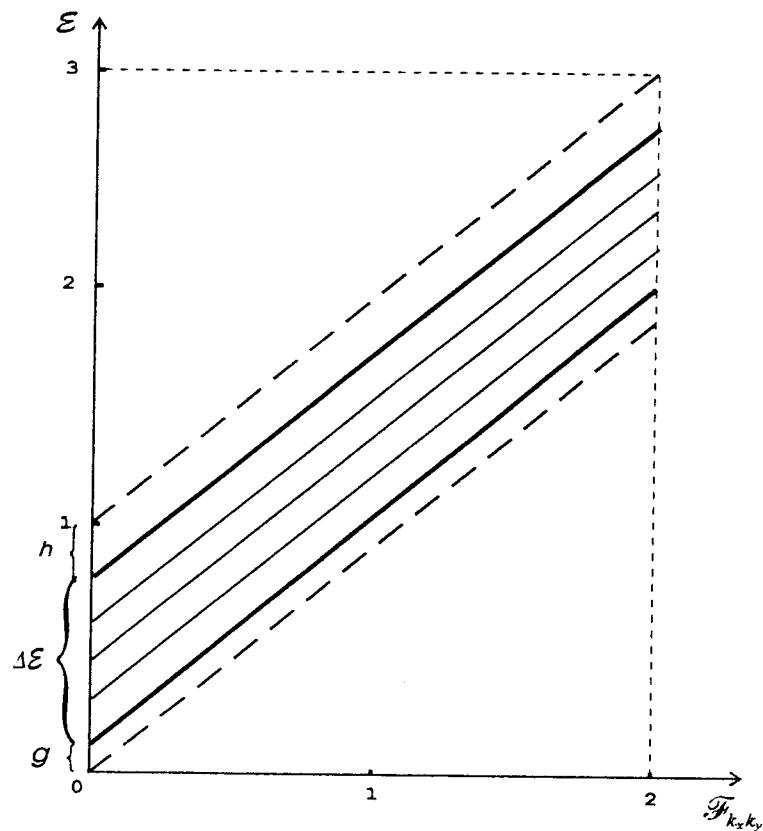
$$k_z(\nu) = \frac{\pi}{a} \frac{\nu}{N_z + 2}; \quad \nu = 1, 2, 3, \dots, N_z + 1 \quad (4.20)$$

Zamenom ovih relacija u (4.18) i uzimajući u obzir da je  $E_{\vec{k}}(\nu) = \hbar\omega_\nu$  i  $\Delta = 6W$ , sledi:

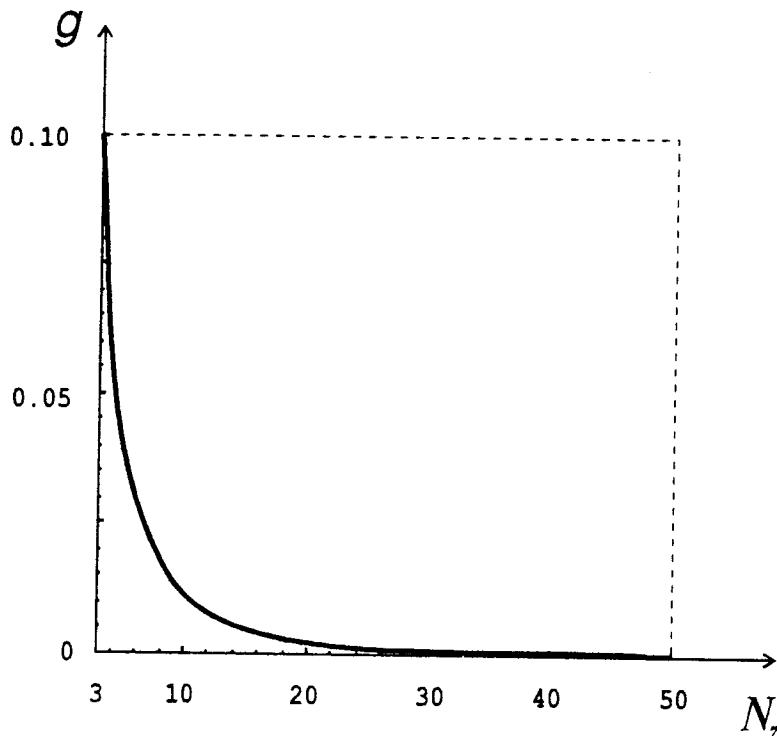
$$\mathcal{E}_{\vec{k}}(\nu) \equiv \mathcal{F}_{k_x k_y} + \mathcal{G}_{k_z}(\nu), \quad (4.21)$$

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

Izraz (4.20) predstavlja zakon disperzije slabo vezanih elektrona u filmu i ima istu formu kao izraz (3.24) dobijen za idealne neograničene strukture, s razlikom što je tamo  $k_z$  praktično kontinualno promenljivo (u intervalu  $[0, \pi/a]$ ) kao što su  $k_x$  i  $k_y$ , a ovde je diskretno - dato izrazom (4.19).



**Slika 4.2:** Zakon disperzije elektrona (elektronskog gasa) u filmu  
Izmedju isprekidanih linija prikazana je zona kontinualnih dozvoljenih energija elektrona u idealnim (neograničenim) strukturama, dok su punim linijama označene diskretne vrednosti elektronskih energija u filmu.



**Slika 4.3:** Energetski gep elektronskog filma  
Zavisnost veličine gepa od debljine kristalnog filma.

Pored toga, uočava se da je:

$$k_x^{\min} = k_y^{\min} = 0 ; \quad k_z^{\min} = \frac{\pi}{a} \frac{1}{N_z + 2} > 0 \quad (4.22)$$

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

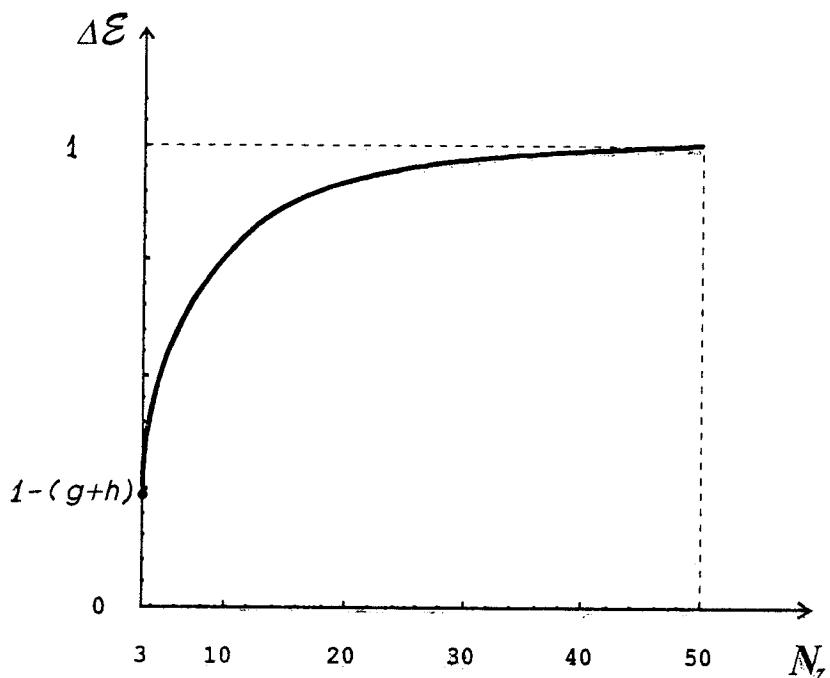
$$k_x^{\max} = k_y^{\max} = \frac{\pi}{a} ; \quad k_z^{\max} = \frac{\pi}{a} \frac{N_z + 1}{N_z + 2} < \frac{\pi}{a} \quad (4.23)$$

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

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

$$g \equiv \mathcal{E}_f^{\min} - \mathcal{E}_b^{\min} = \left( \frac{\pi}{N_z + 2} \right)^2 ; \quad h \equiv \mathcal{E}_b^{\max} - \mathcal{E}_f^{\max} = 2 \left( \frac{\pi}{N_z + 2} \right)^2 \quad (4.24)$$

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



Slika 4.4: Zona dozvoljenih energije elektrona u filmu  
Zavisnost širine energetske zone od debljine kristalnog filma.

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

$$\Delta E \equiv (\Delta E)_f = (\Delta E)_b - (g + h) = 1 - \left[ \frac{\pi}{2(N_z + 2)} \right]^2 \quad (4.25)$$

Sa slike se vidi da se širina energetske zone elektrona kristalnog filma veoma brzo (parabolički) približava balkovskoj vrednosti, kada se debljina filma povećava, tj. kada raste broj slojeva  $N_z$ . Za izuzetno tanke filmove  $(\Delta E)_f$  je veoma uska, dok za  $N_z \rightarrow \infty$  ona teži  $(\Delta E)_b$ .

## 5. ZAKLJUČAK

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

1. Ove analize su pokazale bitne razlike u zakonu disperzije elektrona u pomenuta dva sistema, kao isključive posledice postojanja granica film-struktura, u kojima elektronski spektri poseduju dva energetska gępa.
2. Posledica postojanja donjeg energetskog gępa može da se tumači na sledeći način: on odgovara energiji osnovnog stanja elektronskog sistema i predstavlja najmanju energiju koju treba uložiti da bi u filmu egzistirao elektronski gas. Sve do te energije elektroni se mogu nalaziti samo u nekim od vezanih stanja. S druge strane, to možemo tumačiti i tako da se u film-strukturama, za veličinu minimalnog energetskog gępa, „podigne” Fermijev nivo. Samo elektroni sa energijama većim od ove minimalne, mogu da učestvuju u transportnim i ostalim fizički interesantnim procesima.
3. Postojanje i drugog (gornjeg) energetskog gępa, zajedno sa donjim, ima za posledicu promenu širine energetske zone elektrona. U odnosu na zonu dozvoljenih energija idealnih struktura sa praktično kontinualnim rasporedom, zona elektronskih dozvoljenih energija u filmu je uža za iznos trostrukog energetskog gępa i izrazito diskretna.
4. Veličine gępova zavise od debljine filma i veoma brzo opadaju sa njenim povećanjem. Na isti način zavisi, ali se povećava i broj diskretnih stanja unutar zone dozvoljenih energija filma i sama širina ove zone.
5. Sve razlike između posmatranih (film i idealnih, tj. neograničenih) sistema su izraženije, što je film tanji, a izčešavaju kada debljina filma teži beskonačnosti.

## 6. LITERATURA

- [1] B.S.Tošić: STATISTIČKA FIZIKA,  
*PMF IF*, Novi Sad 1978.
- [2] A.S.Davydov: TEORIYA TVERDOGO TELA,  
*Nauka*, Moskva 1976.
- [3] G.Rickayzen: GREEN'S FUNCTIONS AND CONDENSED MATTER,  
*Academic Press*, London 1980.
- [4] Ch.Kittel: UVOD U FIZIKU ČVRSTOG STANJA,  
*Sav.Admin.* Beograd 1970.
- [5] M.I.Kaganov: ELEKTRONY, FONONY, MAGNONY,  
*Nauka*, Moskva 1979.
- [6] I.Supek: TEORIJSKA FIZIKA I STRUKTURA MATERIJE,  
*Školska knjiga*, Zagreb 1977.
- [7] D.Lj.Mirjanić, S.M.Stojković, J.P.Šetrajčić and S.K.Jaćimovski  
ELECTRON SPECTRA IN CRYSTAL FILMS  
*Proceedings 20th MIEL*, 177-179 (1995).
- [8] J.P.Šetrajčić, S.M.Stojković, S.Lazarev, D.Lj.Mirjanić and S.K.Jaćimovski  
CHARGE CARRIERS DENSITY OF STATES  
IN THIN SUPERCONDUCTIVE FILMS  
*Proceedings 4th Cryogenics* - prihvaćeno (1996).
- [9] M.Pantić, S.Lazarev, S.M.Stojković, J.P.Šetrajčić,  
D.Lj.Mirjanić, Z.Rajilić and S.K.Jaćimovski  
MICROSCOPIC PROPERTIES OF LOW  
DIMENSIONAL MOLECULAR STRUCTURES  
*Proceedings 4th International Conference on Dielectric  
and Related Phenomena (DRP)* - prihvaćeno (1996).
- [10] S.K.Jaćimovski, S.M.Stojković, A.Slavković,  
J.P.Šetrajčić, D.Lj.Mirjanić and S.Lazarev  
ELECTRON STATES IN CRYSTAL FILM-STRUCTURES  
*Zbornik Matice srpske* (pr.nauke) - prihvaćeno (1996).
- [11] J.P.Šetrajčić, D.Lj.Mirjanić, Z.V.Bundalo, Z.Rajilić, S.Lazarev,  
M.Pantić, V.M.Zorić, N.V.Delić, A.S.Utješanović,  
S.M.Stojković, S.K.Jaćimovski, I.D.Vragović i A.Slavković  
SPEKTRI I STANJA FONONA I ELEKTRONA  
U JEDNOSLOJNIM KRISTALnim STRUKTURAMA<sup>1</sup>  
*SFIN* - prihvaćeno (1996).
- [12] J.P.Šetrajčić, S.M.Stojković, S.Lazarev, D.Lj.Mirjanić and M.Budinčević  
GREEN'S FUNCTIONS METHOD APPLICATION ON CRYSTAL  
STRUCTURES WITH BROKEN TRANSLATIONAL SYMMETRY  
*Zbornik radova - 10. PriM*, 73-81 (1996).

<sup>1</sup> Pregledni rad po pozivu