

UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET
INSTITUT ZA FIZIKU

УНИВЕРЗИТЕТ У НОВОМ САДУ
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ

ПРИМЉЕНО: 01.02.2000.	
ОРГАНИЗ.ЈЕД.	БРОЈ
0603	9/10

- DIPLOMSKI RAD -

ELEKTRONSKI SPEKTRI U PERTURBOVANOJ
KRISTALNOJ FILM-STRUKTURI SA PODREŠETKOM

MENTOR

PROF.DR JOVAN ŠETRAJČIĆ

KANDIDAT

SLOBODANKA RADONJIĆ

Novi SAD, 2000. godine

*„Čovek teži da sazna sve,
jer su saznanja hrana za njegov um.“*

Monah Pahomije

*Želela bih, ovom prilikom, da se zahvalim na velikoj pomoći pri radu
mentoru prof. dr Jovanu Šetrajiću i kolegici Danijeli Šijačić.*

Sadržaj

1	U v o d	4
2	Elektroni u kristalima	5
2.1	Slobodan elektronski gas	5
2.2	Elektroni u periodičnom potencijalu	6
2.3	Redukovani talasni vektor	8
2.4	Prebrojavanje stanja	9
2.5	Brzina, ubrzanje i efektivna masa	10
2.6	Spektri i stanja elektrona u neograničenim kristalima	11
2.6.1	Kristal sa primitivnom kubnom rešetkom	12
2.6.2	Kristalna struktura sa podrešetkom	13
3	Elektroni u tankim filmovima	16
3.1	Perturbovana film-struktura sa primitivnom kubnom rešetkom	16
3.1.1	Jednačine kretanja	17
3.1.2	Zakon disperzije	18
3.2	Perturbovana kristalna film-struktura sa podrešetkom	20
4	Zaključak	26
5	Literatura	27

1 U v o d

Za teoriju čvrstog stanja od velikog značaja je ispitivanje uticaja elektronskog podsistema na fizičke karakteristike materijala i analiza elektronskih stanja u kristalnim strukturama, jer su elektroni nosioci svih transportnih procesa i fizičkih osobina materijala. Najčešći predmet analiza su homogene strukture sa osobinom translacione invarijantnosti. U praksi, međutim, idealne strukture ne postoje. Kod realnih kristala je narušena translaciona invarijantnost postojanjem graničnih površina i defektima pakovanja (vakancije, dislokacije). Film je realnija kristalna struktura, beskonačna u svim kristalnim ravnima paralelnim dvema graničnim površinama, koje su normalne na jedan prioritetan pravac duž kojeg je posmatrani sistem ograničen.

Predmet ovog rada je izučavanje film-strukture sa izmenjenim uslovima na graničnim površinama (perturbovana film-struktura). Na osnovu modela perturbovane film-strukture sa primitivnom kubnom rešetkom (sačinjene od atoma iste vrste) je analizirana perturbovana film-struktura sa podrešetkom (sačinjena od dve vrste naizmenično poredjanih atoma). U ovom radu su istraženi i energetske spektri i moguća stanja elektrona (zakon disperzije).

Jedan od metoda kojim se ovaj problem tretira je metod dvovremenskih temperaturnih Grinovih funkcija. U ovoj analizi su upravo one korišćene zbog pogodnosti koje nam nudi definicija polova Grinovih funkcija. Naime, iz realnih delova polova (proporcionalni energijama elementarnih eksitacija koje se javljaju u sistemu) dobija se zakon disperzije elektrona, a imaginarni delovi polova su proporcionalni recipročnim vrednostima vremena života tih eksitacija.

2 Elektroni u kristalima

Veliki broj važnih fizičkih osobina se može 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 između 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 uspeha ali i nedostataka. U uspehe spadaju izvodjenje Omovog zakona ($j = \sigma E$) i izvodjenje veze između električne i toplotne provodnosti. Međutim, totalni neuspeh je doživela u objašnjenju toplotnog kapaciteta i paramagnetne susceptibilnosti provodnih elektrona. 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 međuatomskih 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.

2.1 Slobodan elektronski gas

Elektroni u metalima se mogu, uz grublje aproksimacije, posmatrati kao i elektroni u Fermijevom gasu slobodnih elektrona (gas slobodnih neinteragujućih elektrona podvrgnutih Paulijevom principu). U fermionskom gasu elektronske energije su zadate kinetičkom energijom translacije:

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

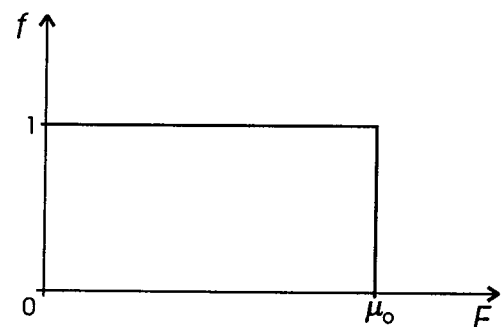
gde je $\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$, \vec{k} - talasni vektor. Ovde će biti razmatran slučaj kada je: $e^\nu \gg 1$, $\nu = \frac{\mu}{kT}$, μ je hemijski potencijal. Kvantni efekti postaju dominantniji ako je toplotna energija znatno niža od hemijskog potencijala: $\mu \gg kT$.

Elektroni su fermi-čestice i pokoravaju se Paulijevom principu. Na apsolutnoj nuli one popunjavaju redom najniža kvantna stanja. Takav gas se naziva potpuno degenerisan fermionski gas. Značaj Paulijevog principa se manifestuje u izgledu funkcije raspodele osnovnog stanja fermiona. Specijalizirajući Fermi-Dirakovu funkciju:

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

na $T = 0$,

$$f = \begin{cases} 1 & E \leq \mu_0 \\ 0 & E > \mu_0 \end{cases}$$



Slika 2.1: Fermijeva funkcija na apsolutnoj nuli

μ_0 - je vrednost hemijskog potencijala na apsolutnoj nuli. Na $T = 0$ sva stanja sa energijama manjim od μ_0 su popunjena, a viša energetska stanja su prazna, pa je μ_0 jednak graničnoj energiji degenerisanog gasa.

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

$$\mu_0 = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} . \quad (2.2)$$

Temperatura pridružena ovoj energiji je temperatura degeneracije: $T_F = \mu_0/k$. Fermionski gas je degenerisan u području gde važi $T \ll T_F$. Brzina čestice obračunata od vrha Fermijeve raspodele se izražava pomoću k_F : $v_F = \hbar k_F/m$ - granična brzina fermiona na apsolutnoj nuli. 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.

2.2 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, elektroni se mogu predstaviti kao nezavisne čestice koje se kreću pod ukupnim uticajem svih sila. Ako se zanemare nepravilnosti u gradnji kristalne rešetke i oscilovanja atoma oko ravnotežnih položaja u rešetki, tada se svaki elektron kreće u potencijalu koji je periodičan sa periodom kristalne ćelije. Neka su ivice elementarne ćelije definisane vektorima $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$, onda su osnovne tačke rešetke date tripletom celih brojeva:

$$\vec{n} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3 . \quad (2.3)$$

S obzirom na takve pomake, potencijal je periodičan, što se izražava uslovom:

$$U(\vec{r} + n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3) = U(\vec{r}) . \quad (2.4)$$

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

$$H u = E u , \quad (2.5)$$

pri čemu je Hamiltonov operator:

$$H(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{r}) . \quad (2.6)$$

U daljem radu će se koristiti operator translacije $T_{\vec{n}}$ definisan relacijom:

$$T_{\vec{n}} F(\vec{r}) = F(\vec{r} + \vec{n}) . \quad (2.7)$$

Kod dve uzastopne translacije vektora \vec{n} i \vec{n}' , rezultanta ne zavisi od redosleda translacija pa operatori $T_{\vec{n}}$ i $T_{\vec{n}'}$ medjusobno komutiraju:

$$T_{\vec{n}} T_{\vec{n}'} = T_{\vec{n}'} T_{\vec{n}} .$$

Hamiltonov operator elektrona u periodičnom potencijalu ne menja se translacijom za vektor \vec{n} :

$$H(\vec{r} + \vec{n}) = H(\vec{r})$$

iz čega sledi:

$$T_{\vec{n}}H(\vec{r})F(\vec{r}) = H(\vec{r} + \vec{n})F(\vec{r} + \vec{n}) = H(\vec{r})T_{\vec{n}}(\vec{r})F(\vec{r}) .$$

U stvari, zbog periodičnosti kristalne rešetke operator translacije komutira sa Hamiltonovim operatorom:

$$T_{\vec{n}} H = H T_{\vec{n}} ,$$

zbog čega su sopstvene funkcije hamiltonijana ujedno i sopstvene funkcije operatora translacije. Označi li sa τ_n sopstvena vrednost operatora $T_{\vec{n}}$ sledi:

$$T_{\vec{n}} u(\vec{r}) = \tau_{\vec{n}} u(\vec{r}) . \quad (2.8)$$

Primenjujući na levoj strani ove relacije svojstvo operatora $T_{\vec{n}}$ iz jednačine (2.7), dolazi se do:

$$u(\vec{r} + \vec{n}) = \tau_{\vec{n}} u(\vec{r}) . \quad (2.9)$$

Svaki vektor translacije \vec{n} može se izraziti kao zbir druga dva vektora translacije:

$$\vec{n} = \vec{n}' + \vec{n}'' , \quad (2.10)$$

pa iz jednačine (2.8) i (2.10) sledi:

$$\tau_{\vec{n}} = \tau_{\vec{n}'} \tau_{\vec{n}''} . \quad (2.11)$$

U skladu sa prethodne dve jednačine, sopstvena vrednost operatora translacije se piše u obliku:

$$\tau_{\vec{n}} = e^{i\vec{k}\vec{n}} , \quad (2.12)$$

a uvrštavanjem ovog izraza u jednačinu (2.9) dobija se:

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

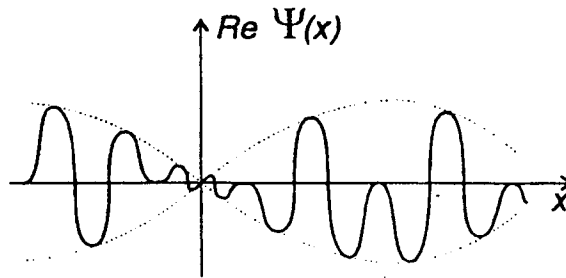
Kako talasne funkcije zavise od talasnog vektora \vec{k} indeksiraće se istim. Uslov (2.13) će biti ispunjen ako je talasna funkcija elektrona jednaka proizvodu ravnog talasa i neke druge funkcije:

$$u_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} v_{\vec{k}}(\vec{r}) , \quad (2.14)$$

za koju važi:

$$v_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{n}) = v_{\vec{k}}(\vec{r}) . \quad (2.15)$$

To je Blohova teorema iz 1928. godine. Prvi faktor u jednačini (2.14) proizilazi iz konstantnog potencijala i u mnogome opisuje „slobodno kretanje elektrona”; drugi faktor je periodična funkcija rešetke i određuje vezivanje elektrona za kristalnu rešetku.



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

Prema relaciji (2.13), prostornim pomeranjem za \vec{n} talasna funkcija menja samo svoju fazu, pa gustina verovatnoće ostaje konstantna:

$$|u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{n})|^2 = |u_{\vec{k}}(\vec{r})|^2,$$

pri čemu je pretpostavljeno da je talasni vektor \vec{k} realan. Uvrštavanjem Blohove funkcije u Šredingerovu jednačinu, dobija se nova jednačina za periodični faktor:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla + i\vec{k})^2 v_{\vec{k}} + U v_{\vec{k}} = E(\vec{k}) v_{\vec{k}} \quad (2.16)$$

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

2.3 Redukovani talasni vektor

Dalja razmatranja se odnose na talasnu funkciju kada se radijus-vektoru elektrona doda priraštaj \vec{a}_1 . Tada je prema Blohovoj teoremi:

$$u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{a}_1) = e^{i\vec{k}\vec{a}_1} u_{\vec{k}}(\vec{r}).$$

Zamenom talasnog vektora \vec{k} nekim drugim talasnim vektorom \vec{k}' koji zadovoljava relaciju

$$\vec{k}' \vec{a}_1 = \vec{k} \vec{a}_1 + 2\pi m_1,$$

gde je m_1 - ceo broj, ne uzrokuje se promena faznog faktora u talasnoj funkciji. Invarijantnost kvantnog sistema prema prostornim pomerajima za \vec{a}_1 , \vec{a}_2 i \vec{a}_3 ima za posledicu višeznačnost talasnog vektora.

Definicije osnovnih vektora recipročnog prostora su:

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\Omega_0}; \quad \vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\Omega_0}; \quad \vec{b}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\Omega_0}, \quad (2.17)$$

gde je Ω_0 - zapremina elementarne ćelije: $\Omega_0 = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$. Iz relacije (2.17) neposredno sledi:

$$\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi \delta_{ij}; \quad i, j = 1, 2, 3.$$

Vektor recipročne rešetke se formira pomoću vektora \vec{b}_1 , \vec{b}_2 , \vec{b}_3 .

$$\vec{g} = g_1 \vec{b}_1 + g_2 \vec{b}_2 + g_3 \vec{b}_3; \quad g_1, g_2, g_3 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Proizvod vektora translacije \vec{n} i vektora \vec{g} jednak je umnošku od 2π , tj.

$$\vec{n} \cdot \vec{g} = 2\pi(n_1 g_1 + n_2 g_2 + n_3 g_3),$$

što znači da talasni vektori koji se dobijaju translacijom za vektor recipročne rešetke:

$$\vec{k} \rightarrow \vec{k}' = \vec{k} + \vec{g}$$

određuju isto stanje elektrona. Radi uklanjanja te višeznačnosti, na talasni vektor se postavljaju uslovi:

$$-\pi < \vec{k} \cdot \vec{a}_1 < \pi; \quad -\pi < \vec{k} \cdot \vec{a}_2 < \pi; \quad -\pi < \vec{k} \cdot \vec{a}_3 < \pi, \quad (2.18)$$

čime se ograničava na redukovano područje. Redukovani talasni vektor ima svojstvo da su iznosi njegovih projekcija na kristalne ose minimalni.

2.4 Prebrojavanje stanja

Umesto kontinualnog talasnog vektora može se pri računanju preći na diskretna stanja. Ako se u smerovima $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ izvrši pomak respektivno za dužine L_1, L_2, L_3 onda se zahteva da se talasne funkcije periodično ponove, pa je pri tome promena talasne funkcije izražena i faznim faktorom:

$$u_{\vec{k}}(\vec{r} + L_i \frac{\vec{a}_i}{a_i}) = e^{i \frac{L_i}{a_i} \vec{k} \cdot \vec{a}_i} u_{\vec{k}}(\vec{r}); \quad i = 1, 2, 3.$$

Talasne funkcije se redukuju na $u_{\vec{k}}(\vec{r})$ samo ako se talasni vektor može predstaviti u obliku:

$$\vec{k} = n_1 \frac{a_1}{L_1} \vec{b}_1 + n_2 \frac{a_2}{L_2} \vec{b}_2 + n_3 \frac{a_3}{L_3} \vec{b}_3. \quad (2.19)$$

Ako je G_1 broj elementarnih ćelija koje se nalaze na dužini L_1 a udaljenost susednih ćelija a_1 , onda je:

$$L_1 = G_1 a_1.$$

Analogno važi za smerove \vec{a}_2 i \vec{a}_3 :

$$L_2 = G_2 a_2; \quad L_3 = G_3 a_3,$$

pa je ukupan broj elementarnih ćelija u kristalu:

$$G = G_1 \cdot G_2 \cdot G_3.$$

Odgovor na pitanje koliko talasnih vektora leži u redukovanom području se dobija na sledeći način. Prvi korak je množenje talasnog vektora vektorima $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$:

$$\vec{k} \cdot \vec{a}_1 = \frac{2\pi n_1}{G_1}; \quad \vec{k} \cdot \vec{a}_2 = \frac{2\pi n_2}{G_2}; \quad \vec{k} \cdot \vec{a}_3 = \frac{2\pi n_3}{G_3}$$

i uvrštavanjem u relaciju (2.18)

$$-\frac{G_1}{2} < n_1 < \frac{G_1}{2}; \quad -\frac{G_2}{2} < n_2 < \frac{G_2}{2}; \quad -\frac{G_3}{2} < n_3 < \frac{G_3}{2},$$

pa sledi da je G_i broj različitih mogućnosti izbora i -te komponente talasnog vektora. Ukupan broj talasnih vektora redukovano područja je $G_1 \cdot G_2 \cdot G_3$. Tako se dolazi do zaključka da je broj mogućih talasnih vektora jednak broju elementarnih ćelija.

Broj stanja u diferencijalnom elementu \vec{k} -prostora dB izračunava se iz relacije:

$$\frac{dB}{G} = \frac{d^3 k}{\Omega_b},$$

gde je Ω_b - zapremina elementarne ćelije u \vec{k} -prostoru: $\Omega_b = \vec{b}_1 (\vec{b}_2 \times \vec{b}_3)$. Izražavanjem $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ pomoću $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$, sledi: $\Omega_b = \frac{(2\pi)^3}{\Omega_0}$.

Kako je zapremina kristala je $V = G\Omega_0$, sledi da je broj stanja u elementu zapremine $d^3 k$:

$$dB = \frac{V}{(2\pi)^3} d^3 k,$$

odakle se dobija veoma važno pravilo transformacije:

$$\sum_k \longrightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3 k.$$

2.5 Brzina, ubrzanje i efektivna masa

Kako kvazislobodni elektroni u metalu čine degenerisan gas, odnosno, podvrgavaju se kvantnoj Fermi-Dirakovoj statistici, potrebno je napustiti klasičnu predstavu elektrona kao čestice i posmatrati njegovu dualnu (čestično-talasnu) kvantnomehantičku prirodu [1,3-7].

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

$$v = \frac{d\nu}{d(1/\lambda)} = \frac{d\omega}{dk} \implies \vec{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla E(\vec{k}). \quad (2.20)$$

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

$$\frac{dE}{dt} = \vec{F} \cdot \vec{v}, \quad (2.21)$$

pa se na osnovu toga dobija izraz za ubrzanje elektrona:

$$\vec{a} \equiv \frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial \vec{k}} \right) = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial \vec{k} \partial \vec{k}} \vec{F} \equiv \frac{\vec{F}}{m^*}, \quad (2.22)$$

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

$$\left(\frac{1}{m^*} \right)_{\alpha\beta} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial k_\alpha \partial k_\beta}; \quad \alpha, \beta = x, y, z. \quad (2.23)$$

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

$$-\frac{\pi}{a} < k_\alpha < \frac{\pi}{a}; \quad \alpha = x, y, z. \quad (2.24)$$

Za ovakvu rešetku tenzor recipročne efektivne mase je simetričan i ima medjusobno jednake dijagonalne komponente. Ukoliko se ta osobina tenzora primeni na izraz (2.22), odnosno (2.1), dobija se zakon disperzije istog oblika kao i kod slobodnog elektrona, ali sa efektivnom masom m^* :

$$E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}. \quad (2.25)$$

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

Zavisno od zakrivljenosti energetske površine, efektivna masa može da bude negativna ili pozitivna (što odgovara elektronima ili šupljinama, respektivno). Ubrzanje nosioca naelektrisanja u kristalnoj rešetki određeno je, ne slobodnom elektronskom masom, već skupom veličina (2.23) koje se menjaju pomeranjem elektronskog stanja u prostoru talasnog vektora. Efektivna masa elementarnih nosioca naelektrisanja je pozitivna oko sredine, a negativna pri kraju redukovanog područja.

Anomalne oblasti ($m^* < 0$) mogu da se objasne posmatrajući kretanje elektrona pod dejstvom konstantnog spoljašnjeg električnog polja \vec{E} . Ako je pre uključenja polja \vec{E} njegova energija bila jednaka nuli, posle uključenja \vec{E} , na elektron počinje da deluje konstantna sila $-e\vec{E}$, pa kvaziimpuls elektrona linearno raste sa vremenom. Svaki put kada elektron dostigne

granicu Brilluene zone¹ $k = +\pi/a$ njegov kvaziimpuls se skokovito menja u suprotni ($k = -\pi/a$). Takvu skokovitu promenu doživljava i brzina elektrona: pozitivnim vrednostima brzine odgovara kretanje elektrona u pravcu delovanja sile, a negativnim nasuprot delovanju te sile. Dakle, kretanje elektrona u kristalu ima oscilatorni karakter. Oblasti negativne mase odgovaraju situaciji da se elektron usporava iako na njega deluje spoljašnja sila sa težnjom da mu poveća brzinu ($k' < k < \pi/a$), odnosno ubrzava iako spoljašnja sila teži da mu smanji brzinu ($-\pi/a < k < -k'$). Medjutim, u toj oblasti faznog \vec{k} -prostora negativno naelektrisani elektron negativne mase, može da se tretira kao pozitivno naelektrisana čestica pozitivne mase - šupljina koja se kreće u skladu sa delovanjem polja $+e\vec{E}$. Prema tome, vidi se da se stanje u zoni može opisati prisustvom kvazičestice koja poseduje istu količinu naelektrisanja kao i elektron, samo suprotnog predznaka. Tim kvazičesticama pripisani su talasni vektori nezauzetih kvantnih stanja, pa se nazivaju šupljinama. Njihov smer kretanja u spoljašnjem polju je suprotan od smera kretanja elektrona. Promena predznaka naelektrisanja ne utiče na izraz za ubrzanje ako se istovremeno promeni i predznak efektivne mase. Kako je masa elektrona pri vrhu zone negativna, efektivna masa šupljina je pozitivna. Znači, šupljine su kvazičestice pozitivnog naelektrisanja i pozitivne mase. Dakle, kretanje elektrona na krajevima zona može da se posmatra i kao kretanje pozitivno naelektrisanih šupljina [1,6].

2.6 Spektri i stanja elektrona u neograničenim kristalima

Ovde su razmotrena neka svojstva elektronskog podsistema idealnog beskonačnog kristala sa primitivnom kubnom rešetkom, kao i kristala koji se sastoji od dve podrešetke (kristal tipa *NaCl*). Polazi se od hamiltonijana kvazislobodnih elektrona [5,7] koji u konfiguracionom prostoru i harmonijskoj aproksimaciji ima oblik:

$$H = \sum_{\vec{n}} \Delta_{\vec{n}} a_{\vec{n}}^{\dagger} a_{\vec{n}} - \sum_{\vec{n}, \vec{\lambda}} W_{\vec{n}, \vec{n}+\vec{\lambda}} a_{\vec{n}}^{\dagger} a_{\vec{n}+\vec{\lambda}}, \quad (2.26)$$

gde su $a_{\vec{n}}^{\dagger}$ i $a_{\vec{n}}$ operatori kreacije i anihilacije elektrona na čvoru kristalne rešetke \vec{n} . Veličina $\Delta_{\vec{n}}$ predstavlja energiju elektrona lokalizovanog na čvoru rešetke \vec{n} , a $W_{\vec{n}, \vec{n}+\vec{\lambda}}$ su matricni elementi elektronskog transfera izmedju susednih čvorova rešetke. Ovde je pretpostavljeno da je broj elektrona po atomu relativno mali (jedan elektron po atomu) tako da se Kulonova interakcija elektrona može zanemariti. U tom slučaju, lako se pokazuje da je hamiltonijan (2.26) ekvivalentan hamiltonijanu elektronskog gasa u aproksimaciji efektivne mase [1,4,5]:

$$H = \sum_{\vec{k}} E_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}}, \quad E_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2 m^*}. \quad (2.27)$$

Hamiltonijan (2.26) napisan u harmonijskoj i aproksimaciji najbližih suseda ima oblik:

$$H = \sum_{n_x n_y n_z} \Delta_{n_x n_y n_z} a_{n_x n_y n_z}^{\dagger} a_{n_x n_y n_z} - \sum_{n_x n_y n_z} a_{n_x n_y n_z}^{\dagger} [W_x (a_{n_x+1, n_y n_z} + a_{n_x-1, n_y n_z}) + W_y (a_{n_x n_y+1, n_z} + a_{n_x n_y-1, n_z}) + W_z (a_{n_x n_y n_z+1} + a_{n_x n_y n_z-1})] . \quad (2.28)$$

Svojstva posmatranog elektronskog sistema analiziraju se pomoću antikomutatorske Grinove funkcije [7-12]

$$G_{\vec{n}, \vec{m}}(t) = \Theta(t) \langle \{ a_{\vec{n}}(t), a_{\vec{m}}^{\dagger}(0) \} \rangle, \quad (2.29)$$

¹Oblast k -prostora u granicama od $-\pi/a$ do $+\pi/a$ unutar kojih se energija elektrona menja kontinualno, i zbog periodičnosti kristala u I Brilluenevoj zoni su sadržane sve fizički neekvivalentne vrednosti talasnog vektora.

koja zadovoljava jednačinu kretanja:

$$i\hbar \frac{d}{dt} G_{\vec{n},\vec{m}}(t) = i\hbar \delta_{\vec{n}\vec{m}} \delta(t) + \Theta(t) \langle \{ [a_{\vec{n}}, H], a_{\vec{m}}^\dagger \} \rangle. \quad (2.30)$$

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

$$\{a_{\vec{n}}, a_{\vec{m}}^\dagger\} = \delta_{\vec{n}\vec{m}}, \quad \{a_{\vec{n}}, a_{\vec{m}}\} = \{a_{\vec{n}}^\dagger, a_{\vec{m}}^\dagger\} = 0, \quad (2.31)$$

tako da jednačina kretanja dobija sledeći oblik:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} G_{\vec{n},\vec{m}}(t) &= i\hbar \delta_{\vec{n}\vec{m}} \delta(t) + \Delta_{\vec{n}} G_{\vec{n},\vec{m}}(t) - \\ &- \left[W_x \left(G_{n_x+1, n_y n_z; \vec{m}}(t) + G_{n_x-1, n_y n_z; \vec{m}}(t) \right) + W_y \left(G_{n_x n_y+1, n_z; \vec{m}}(t) + \right. \right. \\ &+ \left. \left. G_{n_x n_y-1, n_z; \vec{m}}(t) \right) + W_z \left(G_{n_x n_y n_z+1; \vec{m}}(t) + G_{n_x n_y n_z-1; \vec{m}}(t) \right) \right]. \end{aligned} \quad (2.32)$$

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

$$G_{\vec{n},\vec{m}}(t) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega G_{\vec{k}}(\omega) e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})-i\omega t}, \quad (2.33)$$

$$\delta_{\vec{n}\vec{m}} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})}; \quad \delta(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega t}, \quad (2.34)$$

gde je $N \equiv N_x N_y N_z$ - ukupan broj elektrona u kristalu.

2.6.1 Kristal sa primitivnom kubnom rešetkom

U ovom slučaju uzimamo da je $\Delta_{\vec{n}} = \Delta$ i $W_x = W_y = W_z = W$ pa se nakon zamene Furije-transformacija (2.33) i (2.34) u jednačinu kretanja (2.32) dobija:

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

odakle dalje sledi:

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

gde

$$E_{\vec{k}} = \hbar \omega_{\vec{k}} = \Delta - 2W (\cos ak_x + \cos ak_y + \cos ak_z) \quad (2.35)$$

predstavlja zakon disperzije vezanih elektrona [5,8-11]. Zakon disperzije slabo vezanih elektrona (degenerisan elektronski gas), kada je $\Delta = 6W$, svodi se na oblik:

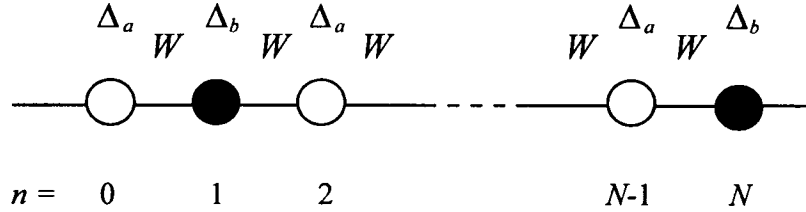
$$E_{\vec{k}} = 4W \left(\sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y}{2} + \sin^2 \frac{ak_z}{2} \right). \quad (2.36)$$

odnosno:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{\vec{k}} \equiv \frac{E_{\vec{k}}}{4W} &= \mathcal{F}_{k_x k_y} + \mathcal{G}_{k_z}, \\ \mathcal{F}_{k_x k_y} &= \sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y}{2}; \quad \mathcal{G}_{k_z} = \sin^2 \frac{ak_z}{2}. \end{aligned} \quad (2.37)$$

2.6.2 Kristalna struktura sa podrešetkom

Da bi se analizirala beskonačna kristalna struktura sa podrešetkom, prvo se posmatra sastavni motiv (beskonačni jednodimenzioni lanac - na slici 2.3) čijim se naizmeničnim redjanjem u sva tri pravca ustvari dobija masivni kristal.



Slika 2.3: Kristalni lanac sa podrešetkom

Analiza ovog kristalnog sistema započinje od standardnog elektronskog hamiltonijana [8]:

$$H = \sum_{\nu} \Delta_{\nu} a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu} - \sum_{\nu, \lambda} W_{\nu, \nu+\lambda} a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu+\lambda}, \quad (2.38)$$

gde su a_{ν}^{\dagger} i a_{ν} operatori kreacije i anihilacije elektrona na čvoru kristalne rešetke ν . Veličina Δ_{ν} predstavlja energiju elektrona lokalizovanog na čvoru ν , a $W_{\nu, \nu+\lambda}$ je energija elektronskog transfera izmedju susednih čvorova rešetke: ν i $\nu + \lambda$ (gde je $\lambda = \pm 1$).

Svojstva posmatranog elektronskog sistema analiziraju se pomoću antikomutatorske Grinove funkcije [7-12]:

$$G_{n,m}(t) = \Theta(t) \langle \{a_n(t), a_m^{\dagger}(0)\} \rangle, \quad (2.39)$$

koja zadovoljava jednačinu kretanja:

$$i\hbar \frac{d}{dt} G_{n,m}(t) = i\hbar \delta_{nm} \delta(t) + \Theta(t) \langle \{[a_n, H], a_m^{\dagger}\} \rangle. \quad (2.40)$$

Ubacivanjem hamiltonijana (2.38), komutator iz prethodne jednačine postaje:

$$\hat{C}_n \equiv [a_n, H] = \sum_{\nu} \Delta_{\nu} [a_n, a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu}] - \sum_{\nu, \lambda} W_{\nu, \nu+\lambda} [a_n, a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu+\lambda}]. \quad (2.41)$$

Korišćenjem antikomutatorskih relacija (2.31) izračunavaju se sabirci iz prethodnog izraza:

$$\begin{aligned} \hat{C}_1 &\equiv \sum_{\nu} \Delta_{\nu} [a_n, a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu}] = \sum_{\nu} \Delta_{\nu} (a_{\nu}^{\dagger} [a_n, a_{\nu}] + [a_n, a_{\nu}^{\dagger}] a_{\nu}) = \\ &= \sum_{\nu} \Delta_{\nu} [a_{\nu}^{\dagger} (a_n a_{\nu} - a_{\nu} a_n) + (a_n a_{\nu}^{\dagger} - a_{\nu}^{\dagger} a_n) a_{\nu}] = \\ &= \sum_{\nu} \Delta_{\nu} (-a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu} a_n + a_n a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu}) = \sum_{\nu} \Delta_{\nu} (a_{\nu}^{\dagger} a_n + a_n a_{\nu}^{\dagger}) a_{\nu} = \sum_{\nu} \Delta_{\nu} \delta_{n\nu} a_{\nu}. \end{aligned} \quad (2.42)$$

Poznato je da $\delta_{n\nu}$ „skida” sumu po ν i svako ν prevodi u n [7], tako da se konačno dobija da je $\hat{C}_1 = \Delta_n a_n$. Analognim postupkom se izračunava i \hat{C}_2 .

$$\begin{aligned} \hat{C}_2 &\equiv \sum_{\nu, \lambda} W_{\nu, \nu+\lambda} [a_n, a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu+\lambda}] = \sum_{\nu, \lambda} W_{\nu, \nu+\lambda} (a_{\nu}^{\dagger} [a_n, a_{\nu+\lambda}] + [a_n, a_{\nu}^{\dagger}] a_{\nu+\lambda}) = \\ &= \sum_{\nu, \lambda} W_{\nu, \nu+\lambda} [a_{\nu}^{\dagger} (a_n a_{\nu+\lambda} - a_{\nu+\lambda} a_n) + (a_n a_{\nu}^{\dagger} - a_{\nu}^{\dagger} a_n) a_{\nu+\lambda}] = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \sum_{\nu,\lambda} W_{\nu,\nu+\lambda} (2a_\nu^+ a_n a_{\nu+\lambda} + 2a_n a_\nu^+ a_{\nu+\lambda} - \delta_{n\lambda} a_{\nu+\lambda}) = \quad (2.43) \\
 &= \sum_{\nu,\lambda} W_{\nu,\nu+\lambda} (2\{a_\nu^+, a_n\} a_{\nu+\lambda} - \delta_{n\lambda} a_{\nu+\lambda}) = \sum_{\nu,\lambda} W_{\nu,\nu+\lambda} \delta_{n\lambda} a_{\nu+\lambda} = \sum_\lambda W_{n,n+\lambda} a_{n+\lambda}.
 \end{aligned}$$

Na osnovu izračunatih komutatora piše se:

$$\Theta(t)\langle\{\hat{C}_1, a_m^+\}\rangle = \Delta_n G_{n,m}; \quad \Theta(t)\langle\{\hat{C}_2, a_m^+\}\rangle = \sum_\lambda W_{n,n+\lambda} G_{n+\lambda,m},$$

tako da jednačina kretanja (2.40) postaje:

$$i\hbar \frac{d}{dt} G_{n,m}(t) = i\hbar \delta_{nm} \delta(t) + \Delta_n G_{n,m} - \sum_\lambda W_{n,n+\lambda} G_{n+\lambda,m}. \quad (2.44)$$

Ukoliko je n parno tj. $n = 2j$, $j = 0, 1, 2, \dots, N$, tada su $G_{n,m} = G_n^a$, $G_{n+\lambda,m} = G_{n+\lambda}^b$, $\Delta_n = \Delta_a$ i $W_{n,n+\lambda} \equiv W$. U tom slučaju jednačina kretanja je:

$$i\hbar \frac{d}{dt} G_n^a(t) = i\hbar \delta_{nm} \delta(t) + \Delta_a G_n^a - \sum_\lambda W G_{n+\lambda}^b. \quad (2.45)$$

Ukoliko je n neparno tj. $n = 2j + 1$, $j = 0, 1, 2, \dots, N$, tada su $G_{n,m} = G_n^b$, $G_{n+\lambda,m} = G_{n+\lambda}^a$, $\Delta_n = \Delta_b$ i $W_{n,n+\lambda} \equiv W$. U tom slučaju jednačina kretanja je:

$$i\hbar \frac{d}{dt} G_n^b(t) = i\hbar \delta_{nm} \delta(t) + \Delta_b G_n^b - \sum_\lambda W G_{n+\lambda}^a. \quad (2.46)$$

U beskonačnoj kristalnoj strukturi sa podrešetkom uvode se sledeće smene: $\Delta_{\vec{n}} \rightarrow \Delta_a$ i $\Delta_{\vec{n}+\vec{\lambda}} \rightarrow \Delta_b$ (a i b su dve različite vrste atoma od kojih je izgrađena kristalna rešetka). Jednačina kretanja za Grinove funkcije (2.32) se prema tome deli na dve jednačine kretanja za dve Grinove funkcije, koje posle Furije-transformacija (2.33) i (2.34) dobijaju oblik:

$$\hbar\omega G_{\vec{k}}^a(\omega) = \frac{i\hbar}{2\pi} + \Delta_a G_{\vec{k}}^a(\omega) - 2G_{\vec{k}}^b(\omega)(W_x \cos a_x k_x + W_y \cos a_y k_y + W_z \cos a_z k_z) \quad (2.47)$$

$$\hbar\omega G_{\vec{k}}^b(\omega) = \frac{i\hbar}{2\pi} + \Delta_b G_{\vec{k}}^b(\omega) - 2G_{\vec{k}}^a(\omega)(W_x \cos a_x k_x + W_y \cos a_y k_y + W_z \cos a_z k_z) \quad (2.48)$$

Pošto se radi o translaciono invarijantnoj kristalnoj strukturi za nalaženja zakona disperzije može se uzeti da su Grinove funkcije $G_n^a \equiv G^a$ i $G_n^b \equiv G^b$. Na taj način se nalaženje zakona disperzije svodi na rešavanje sistema jednačina sa dve nepoznate Grinove funkcije G^a i G^b , čiji polovi (u (ω, \vec{k}) prostoru [12]) definišu energije elementarnih ekscitacija u posmatranom sistemu. Kako se rešenja gornjeg sistema jednačina mogu napisati kao $\frac{D_G}{D}$, gde su D_G determinanta promenljive, a D determinanta sistema, uslov za nalaženje polova Grinovih funkcija se svodi na izračunavanje nula determinante gornjeg sistema jednačina:

$$D = \begin{vmatrix} \hbar\omega - \Delta_a & 2(W_x \cos a_x k_x + W_y \cos a_y k_y + W_z \cos a_z k_z) \\ 2(W_x \cos a_x k_x + W_y \cos a_y k_y + W_z \cos a_z k_z) & \hbar\omega - \Delta_b \end{vmatrix} = 0 \quad (2.49)$$

Razvijeni oblik determinante (uz smenu $E = \hbar\omega$) je kvadratna jednačina oblika:

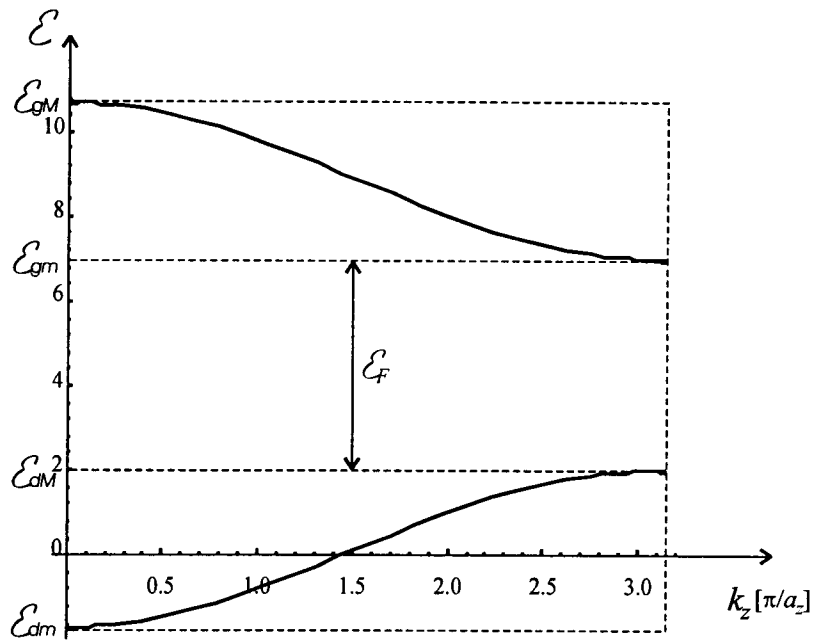
$$E^2 - E(\Delta_a + \Delta_b) + \Delta_a \Delta_b - 4 \left(\sum_{i=x,y,z} W_i \cos a_i k_i \right)^2 = 0, \quad (2.50)$$

čija su rešenja:

$$E = \frac{\Delta_a + \Delta_b}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(\Delta_a - \Delta_b)^2 + 16 \left(\sum_{i=1}^3 W_i \cos a_i k_i \right)^2} . \quad (2.51)$$

Uvodjenjem novog parametra $\theta = \frac{\Delta_b}{\Delta_a}$, zakon disperzije postaje:

$$E = (1 + \theta) \frac{\Delta_a}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(1 - \theta)^2 \Delta_a^2 + 16 \left(\sum_{i=1}^3 W_i \cos a_i k_i \right)^2} . \quad (2.52)$$



Slika 2.4: Zakon disperzije elektrona kristala tipa NaCl

Na slici 2.4 predstavljen je zakon disperzije elektrona u beskonačnom kristalu sa podrešetkom za $k_x = k_y = 0$, $\Delta_a = 6W$ i $\theta = 0.5$, pri čemu je uzeto da je $W_x = W_y = W_z = W$. Energetska zona kristalne strukture sa podrešetkom je kontinualna, kao kod kristala sa primitivnom kubnom rešetkom, ali se cepa na dve podzone dozvoljenih elektronskih stanja, medjusobno razdvojene zabranjenom zonom. Karakteristične redukovane energije ($\mathcal{E} \equiv \frac{\hbar\omega}{W}$) za ovaj sistem izračunate su iz jednačine (2.52) uzimajući $k_x = k_y = 0$ i $k_z = 0$ za \mathcal{E}_{dm} i \mathcal{E}_{gM} , kao i $k_z = \pi$ za \mathcal{E}_{dM} i \mathcal{E}_{gm} . Na taj način se dobija:

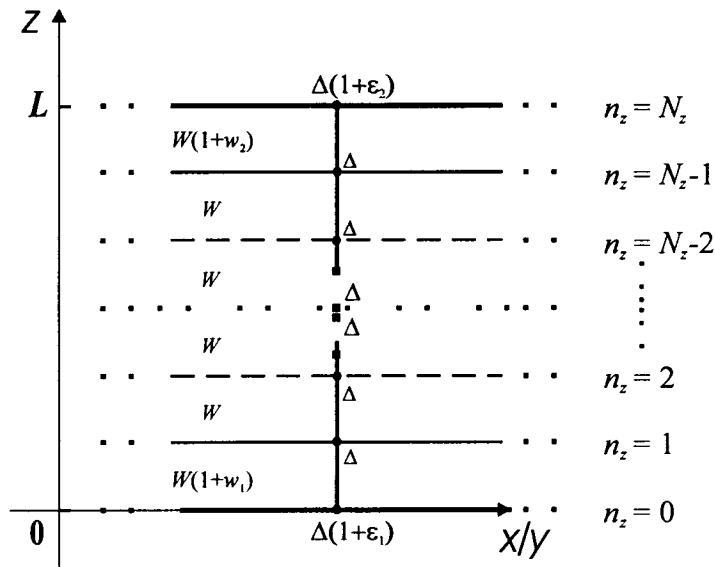
$$\mathcal{E}_{dm} = -1.68 ; \quad \mathcal{E}_{dM} = 2.00 ; \quad \mathcal{E}_{gm} = 7.00 ; \quad \mathcal{E}_{gM} = 10.68 , \quad (2.53)$$

gde su $\mathcal{E}_{(d/g)m}$ minimalne i $\mathcal{E}_{(d/g)M}$ maksimalne redukovane energije donje d i gornje g dozvoljene energetske zone. Stoga je širina zabranjene energetske zone:

$$\mathcal{E}_F = \mathcal{E}_{gm} - \mathcal{E}_{dM} = 5.00 . \quad (2.54)$$

3 Elektroni u tankim filmovima

Primenjujući isti metod i postupak izračunavanja kao kod neograničenih kristalnih sistema ovde će biti izračunat zakon disperzije u kristalnim film-strukturama. Za razliku od idealnih beskonačnih struktura, realni kristali ne poseduju osobinu translacione invarijantnosti. Postojanje izvesnih graničnih uslova, jedan je od uzroka narušenja simetrije [2,3]. Sistemi koji imaju dve paralelne granične površine nazivaju se filmovima. Posmatra se idealni tanki film (kubne kao i kristalne strukture sa podrešetkom), 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 (slika 3.1).



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

3.1 Perturbovana film-struktura sa primitivnom kubnom rešetkom

Hamiltonijan vezanih elektrona u tankim kristalnim filmovima se formira polazeći od „balkovskog” hamiltonijana (2.26), odnosno (2.28), koji u aproksimaciji najbližih suseda ima razvijeni oblik [8-11]:

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

Pošto su granične površine filma uzete normalno na z - pravac, indeks sloja n_z u (3.1) - uzima vrednosti $n_z = 0, 1, 2, \dots, N_z$, gde je $N_z \in [2, 20]$ kod ultratankih filmova. Indeksi n_x i n_y , koji odredjuju položaj atoma u svakom sloju mogu imati proizvoljne celobrojne vrednosti (praktično, od $-\infty$, do $+\infty$).

Razmatra se analitički rešiv slučaj koji odgovara film-strukturi koja je „isečena” iz beskonačne. Zbog postojanja granica filma i zbog izmenjenih uslova na tim granicama energija elektrona je sledećeg oblika [8]:

$$\begin{aligned} \Delta_{n_x n_y n_z} &= 0 & \text{za } n_z < 0 \text{ i } n_z > N_z, \\ \Delta_{n_x n_y n_z} &= \Delta & \text{za } 0 < n_z < N_z, \\ \Delta_{n_x n_y 0} &= \Delta_{n_x n_y N_z} \equiv \Delta(1 + \varepsilon), \end{aligned} \quad (3.2)$$

a matricni elementi elektronskog preskoka sa sloja na sloj su:

$$\begin{aligned} W_{n_x n_y 0; n_x n_y n_z} &= 0 & \text{za } n_z < 0, \\ W_{n_x n_y N_z; n_x n_y n_z} &= 0 & \text{za } n_z > N_z, \\ W_{n_x n_y n_z; n_x n_y, n_z+1} &= W & \text{za } 0 < n_z < N_z - 1, \\ W_{n_x n_y n_z; n_x n_y, n_z-1} &= W & \text{za } 1 < n_z < N_z, \\ W_{n_x n_y 0; n_x n_y, 1} &= W_{n_x n_y N_z-1; n_x n_y, N_z} \equiv W(1 + w), \end{aligned} \quad (3.3)$$

pri čemu je za svaki sloj $W_{n_x n_y n_z; n_x \pm 1, n_y n_z} = W_{n_x n_y n_z; n_x n_y \pm 1, n_z} \equiv W$, (3.4)

gde je W - konstanta elektronskog transfera idealnog kristala.

Elektronski hamiltonijan tankih kristalnih filmova se sada piše u obliku:

$$H = H_z + H_p, \quad (3.5)$$

gde se H_z odnosi na unutrašnjost filma i ima isti oblik kao hamiltonijan beskonačnog kristala, dok H_p izražava uticaj prisustva granica film-strukture:

$$\begin{aligned} H_z &= \sum_{m_x m_y} \sum_{m_z=1}^{N_z-1} a_{m_x m_y m_z}^+ \left[\Delta a_{m_x m_y m_z} - W (a_{m_x+1, m_y m_z} + a_{m_x-1, m_y m_z} + \right. \\ &\quad \left. + a_{m_x m_y+1, m_z} + a_{m_x m_y-1, m_z} + a_{m_x m_y m_z+1} + a_{m_x m_y m_z-1}) \right]; \\ H_p &= \sum_{m_x m_y} \left\{ a_{m_x m_y 0}^+ [(1 + \varepsilon)\Delta a_{m_x m_y 0} - W(1 + w) a_{m_x m_y 1}] + \right. \\ &\quad + a_{m_x m_y N_z}^+ [(1 + \varepsilon)\Delta a_{m_x m_y N_z} - W(1 + w) a_{m_x m_y N_z-1}] - \\ &\quad - W a_{m_x m_y 0}^+ (a_{m_x+1, m_y 0} + a_{m_x-1, m_y 0} + a_{m_x m_y+1, 0} + a_{m_x m_y-1, 0}) - \\ &\quad \left. - W a_{m_x m_y N_z}^+ (a_{m_x+1, m_y N_z} + a_{m_x-1, m_y N_z} + a_{m_x m_y+1, N_z} + a_{m_x m_y-1, N_z}) \right\}. \end{aligned} \quad (3.6)$$

3.1.1 Jednačine kretanja

Pomoću tako prethodno definisanog hamiltonijana, najpre se izračunavaju jednočestične antikomutatorske Grinove funkcije:

$$G_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z}(t) = \Theta(t) \langle \{ a_{n_x n_y n_z}(t), a_{m_x m_y m_z}^+(0) \} \rangle, \quad (3.7)$$

koje određuju ravnotežna svojstva elektrona u tankim kristalnim filmovima. Elektronske Grinove funkcije se mogu izračunati mikroteorijskom procedurom na sličan način kao što je uradjeno u prethodnoj glavi, s tim što se ovde zbog ograničenosti strukture uvodi delimična prostorna Furije transformacija²:

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

²Prostorna Furije-transformacija mora biti delimična $(n_x n_y n_z) \rightarrow (k_x, k_y, n_z)$ jer je posmatrani sistem ograničen duž z-pravca.

($n_z = 0, 1, 2, \dots, N_z$ i $a_x = a_y = a$), te zamenom gornjih transformacija u jednačinu kretanja (2.32) dobija se sistem jednačina [8-11]:

$$\begin{aligned}
 (\varrho - \varepsilon) G_0 + (1 + w)G_1 &= \mathcal{K}_0 \\
 (1 + w)G_0 + \varrho G_1 + G_2 &= \mathcal{K}_1 \\
 G_1 + \varrho G_2 + G_3 &= \mathcal{K}_2 \\
 &\vdots \\
 G_{n_z-1} + \varrho G_{n_z} + G_{n_z+1} &= \mathcal{K}_{n_z} \\
 &\vdots \\
 G_{N_z-3} + \varrho G_{N_z-2} + G_{N_z-1} &= \mathcal{K}_{N_z-2} \\
 G_{N_z-2} + \varrho G_{N_z-1} + (1 + w)G_{N_z} &= \mathcal{K}_{N_z-1} \\
 (1 + w)G_{N_z-1} + (\varrho - \varepsilon) G_{N_z} &= \mathcal{K}_{N_z}
 \end{aligned} \tag{3.9}$$

gde su uvedene oznake:

$$\begin{aligned}
 \varrho &= \hbar \frac{\omega}{W} - \frac{\Delta}{W} + 2(\cos ak_x + \cos ak_y) ; \\
 G_{n_z; m_z}(k_x, k_y; \omega) &\equiv G_{n_z} ; \quad \mathcal{K}_{n_z} = \frac{i\hbar}{2\pi W} \delta_{n_z, m_z}
 \end{aligned} \tag{3.10}$$

(indeks m_z je „parazitski”, pa je ovde izbačen).

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

$$G_{n_z} = \frac{D_{n_z}}{D_{N_z+1}} , \tag{3.11}$$

gde D_{n_z} predstavlja odgovarajuću „zamensku” determinantu, a D_{N_z+1} - determinantu sistema.

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

$$D_{N_z+1} \equiv 0 . \tag{3.12}$$

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

$$D_{N_z+1}(\varrho) = \varrho^2 C_{N_z-1} - 2\varrho C_{N_z-2} + C_{N_z-3} , \tag{3.13}$$

gde je C_{N_z} karakteristični Čebiševljev polinom druge vrste [11].

3.1.2 Zakon disperzije

Upoređujući gornju determinantu sa Čebiševljevim polinomima vidi se da je:

$$D_{N_z+1}(\varrho) = C_{N_z+1}(\zeta) = \frac{\sin(N_z + 2)\zeta}{\sin \zeta} ; \quad \varrho = 2 \cos \zeta . \tag{3.14}$$

Iz uslova (3.11), tj. za $C_{N_z+1} \equiv 0$, dobija se:

$$\zeta_\mu = \frac{\pi \mu}{N_z + 2} ; \quad \mu = 1, 2, 3, \dots, N_z + 1 , \tag{3.15}$$

a na osnovu ovoga i jednačine (3.9) sledi:

$$\hbar \omega_\mu = \Delta - 2W (\cos ak_x + \cos ak_y - \cos \zeta_\mu) , \tag{3.16}$$

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

$$k_z(\nu) = \frac{\pi}{a} \frac{\nu}{N_z + 2}; \quad \nu = 1, 2, 3, \dots, N_z + 1. \quad (3.17)$$

Zamenom ovih relacija u (3.14) i uzimajući u obzir da je $E_{\vec{k}}(\nu) = \hbar\omega_\nu$ i $\Delta = 6W$, sledi:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{\vec{k}}(\nu) &\equiv \frac{E_{\vec{k}}(\nu)}{4W} = \mathcal{F}_{k_x k_y} + \mathcal{G}_{k_z}(\nu), \\ \mathcal{F}_{k_x k_y} &= \sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y}{2}; \quad \mathcal{G}_{k_z}(\nu) = \sin^2 \frac{ak_z(\nu)}{2}. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Izraz (3.17) predstavlja zakon disperzije slabo vezanih elektrona u filmu (grafički je prikazan na slici 3.2) i ima istu formu kao izraz (2.37) dobijen za idealne neograničene strukture, s razlikom što je tamo k_z praktično kontinualno promenljivo (u intervalu $[0, \pi/a]$)³ kao što su k_x i k_y , a ovde je diskretno - dato izrazom (3.16).

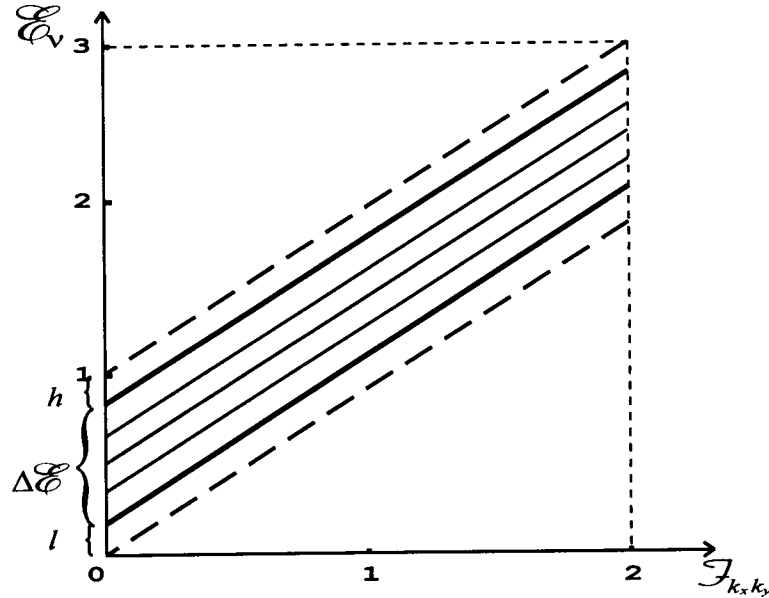
Pored toga, uočava se da je:

$$k_x^{min} = k_y^{min} = 0; \quad k_z^{min} = \frac{\pi}{a} \frac{1}{N_z + 2} > 0, \quad (3.19)$$

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

$$k_x^{max} = k_y^{max} = \frac{\pi}{a}; \quad k_z^{max} = \frac{\pi}{a} \frac{N_z + 1}{N_z + 2} < \frac{\pi}{a}. \quad (3.20)$$

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



Slika 3.2: Zakon disperzije elektrona u filmu sa primitivnom kubnom rešetkom

Na slici je predstavljen energetski spektar elektrona u petoslojnom kristalnom filmu sa primitivnom kubnom rešetkom. Vidi se da je energetska zona u kristalnom filmu izrazito diskretna (broj diskretnih energetskih stanja je jednak broju slojeva filma) i uža od energetske zone

³ Posmatra se samo „desna“ polovinu spektra ($k_j \geq 0$, $j = x, y, z$) znajući da je on ogledalski simetričan.

beskonačnog kristala (koja je predstavljena isprkidanim linijama). U skladu sa tim, sledi zaključak da elektronski spektar u tankom filmu poseduje dva energetska gepa, donji l i gornji h :

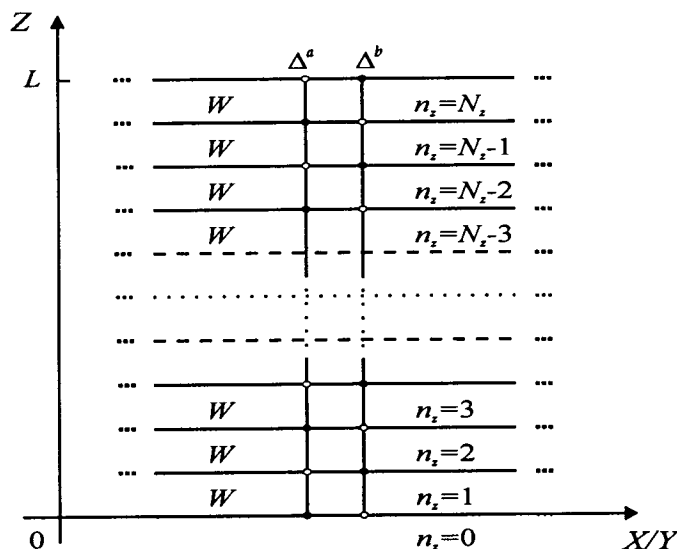
$$l \equiv \mathcal{E}_f^{min} - \mathcal{E}_b^{min} = \frac{1}{4} \left(\frac{\pi}{N_z + 2} \right)^2 \equiv \mathcal{E}_b^{max} - \mathcal{E}_f^{max} = h \quad (3.21)$$

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

3.2 Perturbovana kristalna film-struktura sa podrešetkom

Na osnovu prethodnog modela filma formiran je model kristalne film-strukture sa podrešetkom - tipa $NaCl$. Sličnim postupkom izračunavanja kao za odgovarajuću beskonačnu kristalnu strukturu, ali uz primenu graničnih uslova iz prethodnog poglavlja dobijen je zakon disperzije elektrona u filmu sa podrešetkom.

Kao i u prethodnom slučaju, narušavanje translacione simetrije duž jednog privilegovanog pravca se uvodi preko indeksa n_z , koji može poprimati vrednosti $n_z = 0, 1, 2, \dots, N_z$, gde $N_z \in [2, 20]$. 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 $z = L$ (slika 3.3).



Slika 3.3: Presek modela kristalne film-strukture tipa $NaCl$

Na ovoj slici je šematski prikazan model kristalne film-strukture sa podrešetkom. Veličina Δ^a predstavlja energiju elektrona lokalizovanog na čvoru vrste a - beli krugovi, dok je Δ^b energija elektrona na čvoru vrste b - crni krugovi.

S obzirom da je tema ovog diplomskog rada posmatranje i analiza modela koji u što većoj meri odgovaraju realnim kristalima uzimaju se u obzir perturbacije na granicama filma. Perturbovane su energije elektrona lokalizovanog na čvoru \vec{n} ($n_z = 0, N_z$): $\epsilon_{0/N_z}^{a/b}$ i elektronski transfer izmedju susednih čvorova koji se nalaze u površinskim slojevima, na granici: $w_{0/N_z}^{a/b}$. Prema tome se može napisati:

$$\begin{aligned}
 W_{n_z, n_z-1} &\equiv W_z^{a/b} = W_z(1 + w_0^{a/b} \delta_{1, n_z}^{b/a} + w_{N_z}^{b/a} \delta_{N_z, n_z}^{b/a}), \\
 W_{n_z, n_z+1} &\equiv W_z^{a/b} = W_z(1 + w_0^{a/b} \delta_{0, n_z}^{a/b} + w_{N_z}^{b/a} \delta_{N_z-1, n_z}^{a/b}), \\
 \Delta_z^{a/b} &= \Delta^{a/b}(1 + \varepsilon_0^{a/b} \delta_{0, n_z}^{a/b} + \varepsilon_{N_z}^{b/a} \delta_{N_z, n_z}^{b/a}).
 \end{aligned} \tag{3.22}$$

U skladu sa gore navedenim hamiltonijan posmatrane strukture je oblika:

$$\begin{aligned}
 H &= \sum_{m_x m_y} \sum_{m_z}^{N_z} a_{m_x m_y m_z}^+ \left[\Delta_z^{a/b} a_{m_x m_y m_z} - \right. \\
 &- W_x^{a/b} (a_{m_x+1, m_y m_z} + a_{m_x-1, m_y m_z}) - W_y^{a/b} (a_{m_x m_y+1, m_z} + a_{m_x m_y-1, m_z}) - \\
 &- W_z \left(1 + w_0^{a/b} \delta_{1, n_z}^{b/a} + w_{N_z}^{b/a} \delta_{N_z, n_z}^{b/a} \right) a_{m_x m_y, m_z-1} - \\
 &\left. - W_z \left(1 + w_0^{a/b} \delta_{0, n_z}^{a/b} + w_{N_z}^{b/a} \delta_{N_z-1, n_z}^{a/b} \right) a_{m_x m_y, m_z+1} \right].
 \end{aligned} \tag{3.23}$$

Zbog ograničenosti sistema moguće je uvesti samo delimičnu Furiije transformaciju (duž x i y pravca) [9,10], nakon koje se dobijaju dva sistema jednačina za $2(N_z + 1)$ Grinovih funkcija. Prvi set: $(G_0^a, G_1^b, G_2^a, \dots, G_{N_z-1}^a, G_{N_z}^b)$ odgovara nizu atoma kada on počinje sa atomom a vrste u prvom XY -sloju ($n_z = 0$), dok u drugom setu: $(G_0^b, G_1^a, G_2^b, \dots, G_{N_z-1}^b, G_{N_z}^a)$ prvi sloj počinje atomom b vrste. S obzirom da je film-struktura, koja se posmatra, izdvojena i izvan nje ničeg nema, važi i $G_{n_z}^{a/b} = 0$ za $N_z < n_z < 0$.

Prvi set jednačina ima sledeći oblik:

$$\begin{aligned}
 \hbar \omega G_{0; m_z}^a &= \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{0; m_z}^a + \Delta^a (1 + \varepsilon_0^a) G_{0; m_z}^a - W_z (1 + w_0^a) G_{1; m_z}^b - \\
 &- 2(W_x \cos a_x k_x + W_y \cos a_y k_y) G_{0; m_z}^b, \\
 \hbar \omega G_{1; m_z}^b &= \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{1; m_z}^b + \Delta^b G_{1; m_z}^b - W_z (1 + w_0^a) G_{0; m_z}^a - W_z G_{2; m_z}^a - \\
 &- 2(W_x \cos a_x k_x + W_y \cos a_y k_y) G_{1; m_z}^a, \\
 &\dots \\
 \hbar \omega G_{2j; m_z}^a &= \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{2j; m_z}^a + \Delta^a G_{2j; m_z}^a - W_z (G_{2j-1; m_z}^b + G_{2j+1; m_z}^b) - \\
 &- 2(W_x \cos a_x k_x + W_y \cos a_y k_y) G_{2j; m_z}^b, \\
 \hbar \omega G_{2j+1; m_z}^b &= \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{2j+1; m_z}^b + \Delta^b G_{2j+1; m_z}^b - W_z (G_{2j; m_z}^a + G_{2j+2; m_z}^a) - \\
 &- 2(W_x \cos a_x k_x + W_y \cos a_y k_y) G_{2j+1; m_z}^a, \\
 &\dots \\
 \hbar \omega G_{N_z-1; m_z}^a &= \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{N_z-1; m_z}^a + \Delta^a G_{N_z-1; m_z}^a - W_z G_{N_z-2; m_z}^b - W_z (1 + w_{N_z}^b) G_{N_z; m_z}^b - \\
 &- 2(W_x \cos a_x k_x + W_y \cos a_y k_y) G_{N_z-1; m_z}^b, \\
 \hbar \omega G_{N_z; m_z}^b &= \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{N_z; m_z}^b + \Delta^b (1 + \varepsilon_{N_z}^b) G_{N_z; m_z}^b - W_z (1 + w_{N_z}^b) G_{N_z-1; m_z}^a - \\
 &- 2(W_x \cos a_x k_x + W_y \cos a_y k_y) G_{N_z; m_z}^a.
 \end{aligned} \tag{3.24}$$

Drugi set jednačina može se predstaviti u sledećem obliku:

$$\begin{aligned}
 \hbar\omega G_{2j;m_z}^a &= \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{2j;m_z}^a + \Delta^a (1 + \varepsilon_0^a \delta_{0,n_z}^a) G_{2j;m_z}^a - W_z G_{2j-1;m_z}^b - \\
 &- W_z (1 + w_0^a \delta_{0,n_z}^a + w_{N_z}^b \delta_{N_z-1,n_z}^a) G_{2j+1;m_z}^b - \\
 &- 2(W_x \cos a_x k_x + W_y \cos a_y k_y) G_{2j;m_z}^b, \\
 \hbar\omega G_{2j+1;m_z}^b &= \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{2j+1;m_z}^b + \Delta^b (1 + \varepsilon_{N_z}^b \delta_{N_z,n_z}^b) G_{2j+1;m_z}^b - \\
 &- W_z (1 + w_0^a \delta_{1,n_z}^b + w_{N_z}^b \delta_{N_z,n_z}^b) G_{2j;m_z}^a - W_z G_{2j+2;m_z}^a - \\
 &- 2(W_x \cos a_x k_x + W_y \cos a_y k_y) G_{2j+1;m_z}^a; \\
 j &= 0, 1, 2, \dots, N_z/2.
 \end{aligned} \tag{3.25}$$

Prvi i drugi set jednačina su međusobno ekvivalentni ukoliko se uvede smena $a \leftrightarrow b$. Opšti oblik jednog od setova (drugog) je tada:

$$\begin{aligned}
 \hbar\omega G_{2j;m_z}^b &= \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{2j;m_z}^b + \Delta^b (1 + \varepsilon_0^b \delta_{0,n_z}^b) G_{2j;m_z}^b - \\
 &- W_z G_{2j-1;m_z}^a - W_z (1 + w_0^b \delta_{0,n_z}^b + w_{N_z}^a \delta_{N_z-1,n_z}^b) G_{2j+1;m_z}^a - \\
 &- 2G_{2j;m_z}^a (W_x \cos a_x k_x + W_y \cos a_y k_y), \\
 \hbar\omega G_{2j+1;m_z}^a &= \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{2j+1;m_z}^a + \Delta^a (1 + \varepsilon_{N_z}^a \delta_{N_z,n_z}^a) G_{2j+1;m_z}^a - \\
 &- W_z (1 + w_0^b \delta_{1,n_z}^a + w_{N_z}^a \delta_{N_z,n_z}^a) G_{2j;m_z}^b - W_z G_{2j+2;m_z}^b - \\
 &- 2G_{2j+1;m_z}^b (W_x \cos a_x k_x + W_y \cos a_y k_y).
 \end{aligned} \tag{3.26}$$

Zbog konciznijeg zapisa uvode se sledeće oznake:

$$\begin{aligned}
 \varrho &= \frac{\hbar\omega}{W_z} - \frac{\Delta^a}{W_z}; & R &= 2 \frac{W_x \cos a_x k_x + W_y \cos a_y k_y}{W_z}; \\
 \mathcal{K}_{n_z;m_z}^{a/b} &= \frac{i\hbar}{2\pi} \frac{\delta_{n_z;m_z}^{a/b}}{W_z}; & \theta &= \frac{\Delta^b}{\Delta^a},
 \end{aligned} \tag{3.27}$$

tako da sada prvi set jednačina dobija sledeću formu (uopšten oblik):

$$\begin{aligned}
 &G_{2j-1;m_z}^b + \left(\varrho - \frac{\Delta^a}{W_z} \varepsilon_0^a \delta_{0,n_z}^a \right) G_{2j;m_z}^a + \\
 &+ \left(1 + w_0^a \delta_{0,n_z}^a + w_{N_z}^b \delta_{N_z-1,n_z}^a \right) G_{2j+1;m_z}^b + R G_{2j;m_z}^b = \mathcal{K}_{2j;m_z}^a, \\
 \left(1 + w_0^a \delta_{1,n_z}^b + w_{N_z}^b \delta_{N_z,n_z}^b \right) G_{2j;m_z}^a + \left[\varrho + \frac{\Delta^a}{W_z} \left(1 - \theta - \theta \varepsilon_{N_z}^b \delta_{N_z,n_z}^b \right) \right] G_{2j+1;m_z}^b + \\
 &+ G_{2j+2;m_z}^a + R G_{2j+1;m_z}^a = \mathcal{K}_{2j+1;m_z}^b.
 \end{aligned} \tag{3.28}$$

a drugi set je:

$$\begin{aligned}
 &G_{2j-1;m_z}^a + \left[\varrho + \frac{\Delta^a}{W_z} \left(1 - \theta - \theta \varepsilon_0^b \delta_{0,n_z}^b \right) \right] G_{2j;m_z}^b + \\
 &+ \left(1 + w_0^b \delta_{0,n_z}^b + w_{N_z}^a \delta_{N_z-1,n_z}^b \right) G_{2j+1;m_z}^a + R G_{2j;m_z}^a = \mathcal{K}_{2j;m_z}^b, \\
 \left(1 + w_0^b \delta_{1,n_z}^a + w_{N_z}^a \delta_{N_z,n_z}^a \right) G_{2j;m_z}^b + \left(\varrho - \frac{\Delta^a}{W_z} \varepsilon_{N_z}^a \delta_{N_z,n_z}^a \right) G_{2j+1;m_z}^a + \\
 &+ G_{2j+2;m_z}^b + R G_{2j+1;m_z}^b = \mathcal{K}_{2j+1;m_z}^a.
 \end{aligned} \tag{3.29}$$

U cilju rešavanja osnovnog zadatka ovog rada - određivanje energije elektrona, potrebno je naći polove Grinovih funkcija, čiji realni delovi predstavljaju energije elementarnih ekscitacija sistema. Kako se rešenja sistema jednačina mogu predstaviti u obliku $G = D_G/D$ (gde je D_G odgovarajuća zamenska determinanta), uslov polova se svodi na $D = 0$. Determinanta sistema se može izraziti u konciznoj formi:

$$D = \begin{vmatrix} \hat{\mathcal{D}}^1_{N_z+1} & \hat{\mathcal{R}}_{N_z+1} \\ \hat{\mathcal{R}}_{N_z+1} & \hat{\mathcal{D}}^2_{N_z+1} \end{vmatrix}_{2(N_z+1)} \quad (3.30)$$

pri čemu je: $\hat{\mathcal{R}}_{N_z+1} = R \cdot \hat{I}_{N_z+1}$, dok \hat{I}_{N_z+1} predstavlja jediničnu matricu, a:

$$\hat{\mathcal{D}}^1_{N_z+1} = \begin{vmatrix} e - \frac{\Delta^a}{W_z} \epsilon_0^a & 1 + w_0^a & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 + w_0^a & e + \frac{\Delta^a}{W_z} (1 - \theta) & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & e & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \dots & e + \frac{\Delta^a}{W_z} (1 - \theta) & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & e & 1 + w_{N_z}^b & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 + w_{N_z}^b & e + \frac{\Delta^a}{W_z} (1 - \theta - \theta \epsilon_{N_z}^b) & 0 \end{vmatrix}_{N_z+1}$$

$$\hat{\mathcal{D}}^2_{N_z+1} = \begin{vmatrix} e + \frac{\Delta^a}{W_z} (1 - \theta - \theta \epsilon_0^b) & 1 + w_0^b & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 + w_0^b & e & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & e + \frac{\Delta^a}{W_z} (1 - \theta) & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \dots & e & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & e + \frac{\Delta^a}{W_z} (1 - \theta) & 1 + w_{N_z}^a & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 + w_{N_z}^a & e - \frac{\Delta^a}{W_z} \epsilon_{N_z}^a & 0 \end{vmatrix}_{N_z+1}$$

Na osnovu uprošćenog modela, parametri na graničnim površinama i u graničnim slojevima treba da budu medjusobno približno isti, tj.

$$\epsilon_0^a = \epsilon_0^b \equiv \epsilon_0 ; \quad \epsilon_{N_z}^a = \epsilon_{N_z}^b \equiv \epsilon_{N_z} ; \quad w_0^a \approx w_0^b \equiv w_0 ; \quad w_{N_z}^a \approx w_{N_z}^b \equiv w_{N_z} .$$

Preuredjivanjem sistema jednačina za nepoznate Grinove funkcije, prvo će biti navedene jednačine za G^a funkcije, a zatim za G^b funkcije. Vrste i kolone u determinanti sistema će tada zameniti svoja mesta, pa se dobija:

$$D = \begin{vmatrix} \hat{\mathcal{A}}_{N_z+1} & \hat{\mathcal{C}}_{N_z+1} \\ \hat{\mathcal{C}}_{N_z+1} & \hat{\mathcal{B}}_{N_z+1} \end{vmatrix}_{2(N_z+1)} \quad (3.31)$$

gde su:

$$\hat{\mathcal{A}}_{N_z+1} = \begin{vmatrix} e - \frac{\Delta}{W_z} \epsilon_0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \dots & e & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & e & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & e - \frac{\Delta}{W_z} \epsilon_{N_z} \end{vmatrix}_{N_z+1}$$

$$\hat{B}_{N_z+1} = \begin{vmatrix} \varrho + \frac{\Delta}{W_z}(1-\theta-\theta\varepsilon_0) & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \varrho + \frac{\Delta}{W_z}(1-\theta) & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \varrho & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \varrho & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \varrho + \frac{\Delta}{W_z}(1-\theta) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \varrho + \frac{\Delta}{W_z}(1-\theta-\theta\varepsilon_{N_z}) & 0 \end{vmatrix}_{N_z+1}$$

$$\hat{C}_{N_z+1} = \begin{vmatrix} R & 1+w_0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 1+w_0 & R & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & R & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \dots & R & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & R & 1+w_{N_z} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1+w_{N_z} & R \end{vmatrix}_{N_z+1}$$

U opštem slučaju uslov $D = 0$ nije analitički rešiv pa se mora pribеći metodama numeričke analize. Na primer, može se uzeti jedna određena vrednost parametra θ kao konstantna, dok se menja debljina filma (komplikovanost računa i mogućnosti našeg hardvera dozvoljavaju samo ovaj interval vrednosti za broj slojeva $N_z + 1 \in [3, 13]$). Iz takve analize dolazi se do zaključka da je elektronski energetski spektar diskretan sa maksimalno mogućim brojem stanja duplo većim od broja slojeva u tom tankom filmu.

Minimalna (\mathcal{E}_{l/h_m}) i maksimalna (\mathcal{E}_{l/h_M}) redukovana energija donje (l) i gornje (h) energetske zone i debljina zabranjene zone (\mathcal{E}_f) strogo zavise od debljine filma. Veličine donjeg i gornjeg energetskog gepa se smanjuju sa povećanjem broja slojeva N_z u filmu, što je bio slučaj i kod jednoatomske⁴ filma. Egzistencija zabranjene zone kao i veličina gepova vezana je isključivo za ultratanke strukture.

Kao i kod jednoatomske filma [8], elektronski energetski spektar zavisi od perturbacionih parametara. Povećanjem energije elektrona lokalizovanih na površinskim slojevima ceo spektar se pomera ka višim energijama, dok se povećanjem energije elektronskog transfera između površinskih slojeva ceo spektar širi. Na taj način neka od elektronskih stanja mogu da izadju van najviše i/ili najniže balkovske energetske zone, kao i da se nadju u zabranjenoj zoni idealnog kristala.

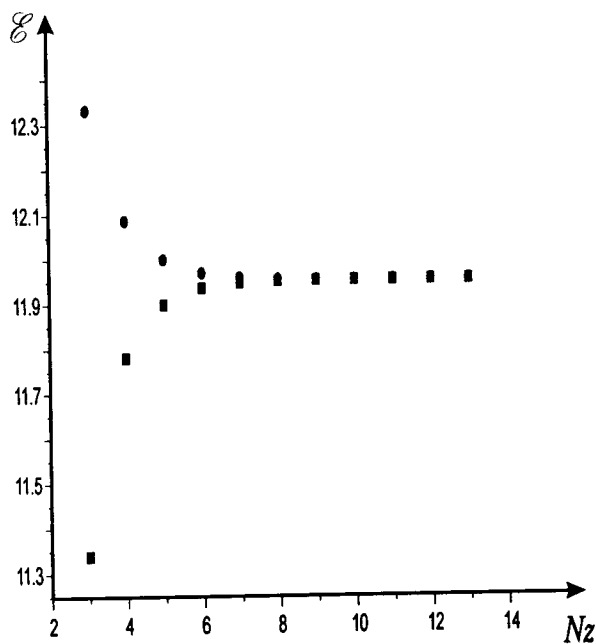
Kao primer za to, za date vrednosti parametara $w_0 = 0.6$; $w_{N_z} = -0.6$; $\varepsilon_0 = 0.5$ i $\varepsilon_{N_z} = -0.5$ (kao i za $\theta = 0.5$, i $k_x = k_y = 0$, $\Delta^a = 6W_z$), pojavljuju se četiri lokalizovana stanja (dva u zabranjenoj zoni, jedno u donjem energetskom gepu i jedno u gornjem). U tabeli 1 je prikazana zavisnost ovih stanja od debljine filma. Isto tako, za određene vrednosti parametara, na pr. $w_0 = w_{N_z} = 1$ i $\varepsilon_0 = \varepsilon_{N_z} = 0.5$, postoje dva lokalizovana stanja, oba u gornjem energetskom gepu i njihov položaj takodje zavisi od debljine filma. Za veće vrednosti debljine filma, ta dva stanja se stapaju u jedno, što je i pokazano na slici 3.4.

Širina zabranjene energetske zone zavisi od vrednosti perturbacionih energetskih parametara. Kad se vrednost perturbacionog parametra elektronskog transfera smanjuje, širina zabranjenog energetskog gepa se povećava. Ukoliko u filmu nema perturbacije energije elektrona lokalizovanog na čvoru (na površi duž z pravca) $\varepsilon = 0$, onda je širina zabranjenog energetskog gepa maksimalna i to je pokazano na slici 3.5.

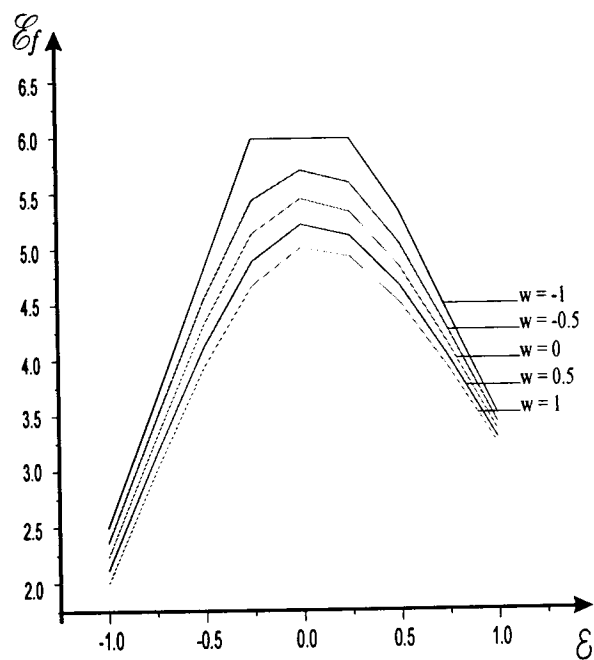
⁴Ovde se pod pojmom jednoatomske podrazumeva, zapravo, kristalna film-struktura sa primitivnom rešetkom.

$N_z + 1$	\mathcal{E}_1	\mathcal{E}_2	\mathcal{E}_3	\mathcal{E}_4
3	-2.018	2.653	6.176	11.8100
4	-2.032	2.693	6.166	11.8450
5	-2.035	2.698	6.164	11.8490
6	-2.036	2.699	6.164	11.8496
7	-2.036	2.699	6.164	11.8496
8	-2.036	2.699	6.164	11.8497
9	-2.036	2.699	6.164	11.8497
10	-2.036	2.699	6.164	11.8497
11	-2.036	2.699	6.164	11.8497
12	-2.036	2.699	6.164	11.8497
13	-2.036	2.699	6.164	11.8497

Tabela 1: Karakteristične energije u perturbovanom filmu sa podrešetkom



Slika 3.4: Položaj lokalizovanih stanja u funkciji debljine filma



Slika 3.5: Širina zabranjene energetske zone

4 Zaključak

Korišćenjem rezultata dobijenih analizom energetske spektara elektrona u idealnim beskonačnim kristalnim strukturama (kristal sa primitivnom kubnom rešetkom i kristal sa podrešetkom), kao i film-strukture, vršeno je ispitivanje perturbovanih film-struktura sa podrešetkom. Važniji rezultati do kojih se došlo ukazuju na potvrdu već postignutih rezultata i otkrivanje novih. Potvrđena su sledeća očekivanja.

1. Kristali sa primitivnom kubnom rešetkom imaju kontinualni energetski spektar što važi i za kristalne strukture sa podrešetkom, s tom razlikom što kod njih postoji i cepanje spektra na dve dozvoljene zone odvojene jednom zabranjenom. Energetske zone kod film-struktura su izrazito diskretne i uže nego kod masivnih uzoraka. Broj diskretnih energetske stanja je kod filma sa primitivnom kubnom rešetkom jednak broju slojeva. Kod film-strukture sa podrešetkom taj broj je dvostruko veći, pošto se energetski spektar cepa na dve podzone.
2. Poredjenjem beskonačnih i film-struktura uočava se osnovna razlika koja se javlja kao posledica ograničenosti filmova - postojanje energetske gepova samo u elektronskom spektru filmova. Veličine gepova opadaju sa povećanjem debljine filma, što znači da egzistiraju samo u ultratankim kristalnim strukturama. U filmu sa podrešetkom javljaju se četiri energetske gepa (dva donja i dva gornja), zabranjena zona je veća, a Fermijev nivo niži.
3. Širina zabranjene zone se menja promenom debljine filma, a samim tim se menjaju transportne i druge relevantne fizičke osobine ovih sistema.

Dobijeni novi rezultati, vezani isključivo za postojanje perturbacija na granicama posmatranih sistema, mogu se sistematizovati u sledeće zaključke.

1. Širina zabranjene zone zavisi od vrednosti energetske perturbacionih parametara. Kada se smanjuje perturbacija elektronskog transfera između površinskih i njima susednih slojeva, širina zabranjene zone se povećava. Širina zabranjene zone ima maksimalnu vrednost ukoliko ne postoji relativna promena energije lokalizovane na čvorovima površinskih slojeva.
2. U ovim strukturama pojavljuju se lokalizovana stanja. Ova stanja su u literaturi poznata kao Tamovska stanja i imaju značajan uticaj na karakteristike sistema kod kojih se javljaju. Izbor perturbacionih parametara utiče na raspored ovih lokalizovanih stanja, a samim tim i na osobine sistema.

Potrebno je još jednom istaći da se pogodnim izborom perturbacionih parametara mogu menjati najvažnije osobine materijala: superprovodnost (vezana za pojavu, raspored i širinu energetske gepova), optičke osobine (pojava i raspodela lokalizovanih stanja), površinski efekti i druge fizičke karakteristike.

5 Literatura

1. D.Raković:
FIZIČKE OSNOVE I KARAKTERISTIKE ELEKTROTEHNIČKIH MATERIJALA,
Elektrotehnički fakultet, Beograd 1995.
2. Z.Ikonić i V.Milanović:
POLUPROVODNIČKE KVANTNE MIKROSTRUKTURE,
Univerzitet u Beogradu, Beograd 1997.
3. S.G.Davison and M.Steslicka:
BASIC THEORY OF SURFACE STATES,
Clarendon, Oxford 1996.
4. I.Supek:
TEORIJSKA FIZIKA I STRUKTURA MATERIJE,
Školska knjiga, Zagreb 1977.
5. W.Jones and N.H.March:
THEORETICAL SOLID STATE PHYSICS,
Dover, New York 1985.
6. A.I.Anselym:
VVEDENIE V TEORIYU POLUPROVODNIKOV,
Nauka, Moskva 1990.
7. B.S.Tošić:
STATISTIČKA FIZIKA,
Institut za fiziku PMF, Novi Sad 1978.
8. S.M.Stojković:
SPEKTRI I STANJA NOSILACA NAELEKTRISANJA I TRANSPORTNE
KARAKTERISTIKE KVAZIDVODIMENZIONIH SUPERPROVODNIH MATERIJALA
Mr teza, *Elektrotehnički fakultet, Beograd 1997.*
9. D.Lj.Mirjanić, S.M.Stojković i J.P.Šetrajić:
MIKROTEORIJSKI PRILAZ ANALIZI FIZIČKIH VELIČINA
OSOBINA TANKIH SLOJNIH STRUKTURA,
Zbornik radova - 41. ETRAN, 400-403 (1997).
10. J.P.Šetrajić, S.Lazarev, S.M.Stojković, S.K.Jaćimovski and D.Lj.Mirjanić:
ELECTRON SPECTRA AND STATES OF ULTRATHIN FILMS,
Bul.Stii.Univ. Politehnica Timisoara (Mat.Fiz.) 42, 50-58 (1997).
11. D.S.Mitrinović, D.Mihailović i P.M.Vasić:
LINEARNA ALGEBRA, POLINIMI, ANALITIČKA GEOMETRIJA,
Gradjevinska knjiga, Beograd 1990.
12. G.Rickayzen:
GREEN'S FUNCTIONS AND CONDENSED MATTER,
Academic Press, London 1980.

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: *Slobodanka Radonjić, br.dos. 222/91* AU
- Mentor: *Dr Jovan Šetrajčić, redovni profesor, PMF, Novi Sad* MN
- Naslov rada: *Elektronski spektri u perturbovanoj kristalnoj film-strukturi sa podrešetkom* NR
- Jezik publikacije: *Srpski (latinica)* JP
- Jezik izvoda: *Srpski* JI
- Zemlja publikovanja: *Jugoslavija* ZP
- Uže geografsko područje: *Vojvodina* UGP
- Godina: *2000.* GO
- Izdavač: *Autorski reprint* IZ
- Mesto i adresa: *Prirodno-matematički fakultet, Trg Dositeja Obradovića 4, 21000 Novi Sad* MA
- Fizički opis rada: *(5/27/12/1/5/3/0)* FO
- Naučna oblast: *Fizika* NO
- Naučna disciplina: *Fizika čvrstog stanja* ND
- Predmetna odrednica / ključne reči: *kristalni filmovi, elektroni, Grinove funkcije, spektri, gepovi, zabranjena zona* PO
- Čuva se: *Biblioteka Instituta za fiziku, PMF, Novi Sad*
- Izvod: *U radu je primenjen metod Grinovih funkcija za ispitivanje uticaja granica film-struktura sa primitivnom kubnom rešetkom i struktura sa dve podrešetke na energetski spektar i moguća stanja elektrona (elektronski zakon disperzije). Dobijeni rezultati predstavljeni su grafički i izvršene su analize, odnosno poredjenja tih rezultata sa odgovarajućim u neograničnim i neperturovanim strukturama. Na osnovu toga uočene su najbitnije razlike izmedju posmatranih sistema.* IZ
- Datum prihvatanja teme od strane Veća: *.02. 2000.* DP
- Datum odbrane: *10 .02. 2000.* DO
- Članovi komisije:
Predsednik:
Dr Ljiljana Mašković, redovni profesor, PMF, Novi Sad
Članovi:
Dr Jovan Šetrajčić, redovni profesor, PMF, Novi Sad
Dr Zoran Mijatović, docent, PMF, Novi Sad KO