

UNIVERZITET U NOVOM SADU  
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET  
Institut za fiziku

Природно-математички факултет  
Радна заједница напредничких послова  
Н С В С А Д

Примљено: - 5. јул - 1994			
Орг. јед.	Број	Датум	Јурисдикт
0603	9/138		

Snežana Bulajić

**FONONSKA STANJA U STRUKTURAMA SA NARUŠENOM  
TRANSLACIONOM SIMETRIJOM**

Diplomski rad

mentor: dr Jovan P. Šetrajčić

NOVI SAD, jula 1994.

*"Ništa nije praktičnije od teorije"*  
*Ludvig Bolcman*

*Ovom prilikom želim da se zahvalim svojim roditeljima na podršci i strpljenju, kao i mom mentoru dr Jovanu Šetrajčiću na pomoći prilikom izrade ovog rada.  
Takođe se zahvaljujem Milošu i Panti.  
Posebnu zahvalnost dugujem Saški na saradnji prilikom spremanja nekih ispita.*

## SADRŽAJ

1. UVOD .....	4
2. OSCILOVANJE KRISTALNE REŠETKE .....	6
2.1 Oscilovanje žice .....	6
2.2 Jednodimenzioni fononski sistemi .....	9
2.3 Trodimenzioni fononski sistemi .....	16
3. OSCILOVANJE ATOMA FILM-STRUKTURA SA NARUŠENOM TRANSLACIONOM SIMETRIJOM .....	20
3.1 Fononska stanja u tankim nedeformisanim filmovima .....	20
3.2 Fononska stanja u tankim deformisanim filmovima .....	22
3.3 Testiranje kristalnih struktura (diskretan slučaj) .....	33
4. ZAKLJUČAK .....	40
5. LITERATURA .....	41

## 1. UVOD

U teorijskoj fizici čvrstog stanja najčešće se analiziraju idealne kristalne strukture koje su prostorno homogene i translaciono invarijantne.

Naravno, ovakve strukture u realnosti ne egzistiraju. Kristali imaju granične površine na kojima dolazi do specifičnih efekata i fizičkih fenomena bitnih za praktičnu primenu. Usled postojanja graničnih površina, kaže se da je kod ovih struktura narušena translaciona simetrija. Na narušenje simetrije utiču i nečistoće (primeše, defekti, vakancije).

Da bi se dobile strukture sa izraženim željenim efektima koristi se moderna tehnologija za njihovo sintetizovanje. Način sinteze velikim delom se određuje teorijskim modelima.

U tom cilju, osnovno je da se ispituju fononska stanja u strukturama sa narušenom translacionom simetrijom.

Zašto se ispituju baš fononi?

Fononi su osnovna pobuđenja u kristalu i, bez obzira o kom se tipu elementarnih eksitacija, kao glavnim nosiocima mehanizama koji omogućavaju određene efekte, radi, oni su uvek prisutni kao podsistem. Zatim, fononi određuju termodinamičko ponašanje kristala, električne, magnetne i superprovodne osobine. Zato je korisno da se prvo oni ispituju.

Kao eksperimentalne metode ispitivanja fononskih stanja koriste se neelastična rasejanja fotona i neutrona na kristalima. Tako se najbolje određuju disperzione relacije za fonone, tj. zavisnost frekvencija od talasnog vektora.

Teorijski, ovaj problem se može rešavati pomoću Hajzenbergovih jednačina kretanja, metodom perturbacija, metodom Grinovih funkcija i sl.

Konkretno, u ovom radu cilj je ustanoviti kod kakvih kristalnih struktura se može očekivati visokotemperaturna superprovodnost. U tom cilju ispituju se tanki deformisani filmovi, tj. uticaj graničnih površina i deformacije duž jednog pravca.

Deformacija se postiže spaterovanjem stranih atoma u osnovnu matricu. Ideja je da se određenom distribucijom masa stvori takva deformacija koja će rezultirati višom kritičnom superprovodnom temperaturom.

U drugoj glavi obrađeni su jednodimenzioni i trodimenzioni fononski sistemi za idealne strukture, a dato je i poglavlje o oscilovanje žice.

U trećoj glavi dati su rezultati ispitivanja za tanke filmove, a zatim su obrađeni deformisani filmovi za simetričan slučaj spaterovanja. Dobijen je zakon disperzije fonona i izraz za fononska stanja u deformisanom filmu. Na osnovu toga određene su aktivacione temperature, tj. temperature do kojih se ovi filmovi ponašaju kao "zamrznute" strukture.

Pošto se pri matematičkoj analizi ovog problema prešlo na kontinualnu aproksimaciju, postojala je sumnja da su dobijeni rezultati posledica te aproksimacije, a ne fizička objektivnost. Zato su testirane određene strukture (troslojna, petoslojna, sedmoslojna, devetoslojna) za diskretan slučaj i izvršeno upoređivanje rezultata, što je prikazano tabelarno.

U četvrtoj glavi dati su zaključci, a na kraju je navedena literatura.

## **2. OSCILOVANJE KRISTALNE REŠETKE**

---

- Oscilovanje žice
- Jednodimenzioni fononski sistemi
- Trodimenzioni fononski sistemi

## 2. OSCILOVANJE KRISTALNE REŠETKE

Fizički procesi u kristalu povezani su sa toplotnim kretanjem (oscilovanjem) atoma oko svojih idealnih ravnotežnih položaja.

Energija vibracije rešetke (elastičnog talasa) je kvantovana. Kvant energije nekog elastičnog talasa naziva se *fonon*.

Pojam fonona uvodi se prilikom kvantnomehaničkih analiza linearnog harmonijskog oscilatora.

Energija linearnog harmonijskog oscilatora je:

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

gde su:

$\omega$  - frekvencija oscilovanja

$n$  - glavni kvantni broj  $n=(0, 1, 2, \dots)$

Razlika energije pri prelasku iz stanja  $n$  u stanje  $n+1$  je:

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = \hbar \omega$$

Ovaj najmanji kvant pobuđenja, energije  $\hbar \omega$ , zove se fonon.

Atomi kristalne rešetke osciluju oko svojih ravnotežnih položaja, pa se kristal može posmatrati kao sistem vezanih oscilatora. Pri tome, atom trpi uticaj ostalih atoma koji ga okružuju, a istovremeno i sam utiče na njihovo oscilovanje. Zato, kad se govori o kristalima, fononi se ne mogu tretirati kao pobuđenja individualnih atoma u kristalu, već kao kolektivna pobuđenja celog kristala.

### 2.1 Oscilovanje žice

Sve moguće oscilacije međusobno spregnutih atoma mogu se predstaviti kao skup interagujućih elastičnih talasa različitih talasnih dužina (frekvencija, energija,...) koji se prostiru u celoj zapremini kristala. Pošto je kristal ograničenih dimenzija, na datoj temperaturi uspostaviće se stanje stacionarnih oscilacija koje predstavlja superpoziciju harmonijskih ravnih talasa - *stojeći talas*.

Posmatra se oscilovanje tanke, sasvim elastične žice, dužine  $l$ , čija je težina zanemarljiva u odnosu na elastične sile.

Neka je žica učvršćena na svojim krajevima.

Ako se žica izvede iz ravnotežnog položaja u pravcu normalnom na pravac žice u nedeformisanom stanju, ona će početi da vrši transverzalne oscilacije.

Diferencijalna jednačina transverzalnih oscilacija glasi:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{P}{\rho} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

gde su:

$P$  - normalni napon

$\rho$  - linearna gustina žice

Ova jednačina određuje elongaciju žice kao funkciju položaja i vremena:

$$u = u(x, t)$$

Ako se žica izvede iz ravnotežnog položaja u pravcu žice, ona počinje da vrši longitudinalne oscilacije. Diferencijalna jednačina longitudinalnih oscilacija je:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{E}{\rho} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

gde je  $E$  - Jangov modul elastičnosti.

Vidi se da diferencijalne jednačine transverzalnih i longitudinalnih oscilacija imaju isti oblik:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (2.1)$$

gde je za transverzalne oscilacije:

$$c_t = \sqrt{\frac{P}{\rho}}$$

a za longitudinalne:

$$c_l = \sqrt{\frac{E}{\rho}}$$

Sad treba naći rešenje jednačine (2.1) na osnovu početnih i graničnih uslova.

Početni uslovi su:

$$u(x, 0) = f(x)$$

$$u'(x, 0) = g(x)$$

Granični uslovi su:

$$u(0, t) = u(l, t) = 0$$

Rešenje  $u = u(x, t)$  može da se traži metodom razdvajanja promenljivih:

$$u(x, t) = T(t)X(x)$$

Zamenom u (2.1) dobija se:

$$\frac{1}{c^2 T} \frac{d^2 T}{dt^2} = \frac{1}{X} \frac{d^2 X}{dx^2} \equiv K$$

tj. dve jednačine:

$$\frac{d^2 T}{dt^2} - Kc^2 T = 0; \quad \frac{d^2 X}{dx^2} - KX = 0$$

Pošto rešenja moraju biti periodična stavlja se  $K = -k^2 < 0$  i dobija:

$$\frac{d^2 T}{dt^2} + k^2 c^2 T = 0; \quad \frac{d^2 X}{dx^2} + k^2 X = 0$$

Opšti integral druge jednačine koji zadovoljava granične uslove je:

$$X = C_1 \sin \frac{n\pi}{l} x$$

a prve:

$$T = C_3 \sin \omega_n t + C_4 \cos \omega_n t$$

gde su:

$$\omega_n = kc = n \frac{\pi c}{l}; \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Odgovarajući partikularni integral za određeno  $n$  glasi:

$$u_n = X \cdot T$$

što se može napisati i u obliku:

$$u_n = \sin \frac{n\pi}{l} x (A_n \sin \omega_n t + B_n \cos \omega_n t)$$

Zbir svih partikularnih integrala za sve vrednosti  $n$  predstavlja opšte rešenje:

$$u(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \sin \frac{n\pi}{l} x (A_n \sin \omega_n t + B_n \cos \omega_n t) \quad (2.2)$$

Amplitude  $A_n$  i  $B_n$  određuju se iz početnih uslova i glase:

$$A_n = \frac{2}{l\omega_n} \int_0^l g(x) \sin \frac{n\pi}{l} x dx$$

$$B_n = \frac{2}{l} \int_0^l f(x) \sin \frac{n\pi}{l} x dx$$



gde su:  $f(x)$ ,  $g(x)$  - unapred date funkcije

Relacija (2.2) opisuje rasprostiranje harmonijskih ravnih talasa u toku vremena kroz elastičnu sredinu. Pri superpoziciji ovakva dva talasa koja se prostiru u suprotnim smerovima, kao rezultujući talas dobija se stojeći talas. Da bi se stojeći talas pojavio, dužina žice mora ispunjavati sledeći uslov:

$$l = m \frac{\lambda}{2} \quad m = 1, 2, 3, \dots$$

## 2.2 Jednodimenzioni fononski sistemi

Da bi se ispitale oscilatorne karakteristike kristala potrebno je hamiltonijan sistema vezanih oscilatora prevesti u hamiltonijan nezavisnih oscilatora. To se svodi na traženje određene unitarne transformacije koja to omogućava.

Hamiltonijan sistema vezanih oscilatora je:

$$H = \sum_{\vec{n}} H_{\vec{n}} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}, \vec{m}} V(\vec{n} - \vec{m}) \quad (2.3)$$

gde su:

$H_{\vec{n}}$  – hamiltonijan izolovanog atoma u čvoru  $\vec{n}$

$V(\vec{n} - \vec{m})$  – potencijal interakcije između atoma u čvorovima  $\vec{n}$  i  $\vec{m}$

Izraz  $U = \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}, \vec{m}} V(\vec{n} - \vec{m})$  predstavlja potencijalnu energiju kristala.

Ovaj izraz ispravan je za  $T = 0$  K. Idealne strukture na  $T = 0$  K zvaće se "zamrznute" strukture.

Pri povišenju temperature, atomi počinju oscilovati. Tada:

$$\vec{n} \rightarrow \vec{n} + \vec{u}(\vec{n}) \quad \vec{m} \rightarrow \vec{m} + \vec{u}(\vec{m})$$

$$V(\vec{n} - \vec{m}) \rightarrow V\{(\vec{n} - \vec{m}) + [\vec{u}(\vec{n}) - \vec{u}(\vec{m})]\}$$

gde je  $\vec{u}(\vec{n})$  - pomeranje atoma iz čvora  $\vec{n}$

Posmatra se kristal na niskoj temperaturi. Tada su pomeraji mali, pa se funkcija  $V$  može razviti u red oko ravnotežnog položaja:

$$V\{(\bar{n} - \bar{m}) + [\bar{u}(\bar{n}) - \bar{u}(\bar{m})]\} = V_0(\bar{n} - \bar{m}) + \sum_{\bar{n}, \bar{m}, \alpha} \left[ \frac{\partial V(\bar{n} - \bar{m})}{\partial (\bar{n} - \bar{m})_\alpha} \right]_0 [u_\alpha(\bar{n}) - u_\alpha(\bar{m})] + \\ + \frac{1}{2} \sum_{\bar{n}, \bar{m}, \alpha, \beta} \left[ \frac{\partial^2 V(\bar{n} - \bar{m})}{\partial (\bar{n} - \bar{m})_\alpha \partial (\bar{n} - \bar{m})_\beta} \right]_0 [u_\alpha(\bar{n}) - u_\alpha(\bar{m})][u_\beta(\bar{n}) - u_\beta(\bar{m})] + \dots$$

Zbog uslova stabilnosti, drugi član sa desne strane jednak je nuli, pa oscilovanje karakteriše samo treći-harmonijski član.

Oscilatorni hamiltonijan sistema dobija se sumiranjem po čvorovima i dodavanjem kinetičke energije:

$$H = \sum_{\bar{n}, \alpha} \frac{M}{2} \dot{u}_\alpha^2(\bar{n}) + \frac{1}{4} \sum_{\bar{n}, \bar{m}, \alpha, \beta} C_{\alpha\beta}(\bar{n} - \bar{m}) [u_\alpha(\bar{n}) - u_\alpha(\bar{m})][u_\beta(\bar{n}) - u_\beta(\bar{m})] \quad (2.4)$$

gde su  $C_{\alpha\beta}(\bar{n} - \bar{m}) = \left[ \frac{\partial^2 V(\bar{n} - \bar{m})}{\partial (\bar{n} - \bar{m})_\alpha \partial (\bar{n} - \bar{m})_\beta} \right]_0$  Hukove konstante elastičnosti.

Međuatomska delovanja vrlo brzo opadaju sa rastojanjem između atoma. Tada se može primeniti aproksimacija najbližih suseda.

$$\bar{n}, \bar{m} \rightarrow \bar{n}, \bar{\lambda}$$

$\bar{\lambda}$  - povezuje atom u čvoru  $\bar{n}$  sa najbližim susedima

Za idealan kristal  $\bar{\lambda}$  je za sve najbliže susede isto. Zato Hukove konstante elastičnosti ne zavise od  $\bar{\lambda}$ .

Hamiltonijan dobija oblik:

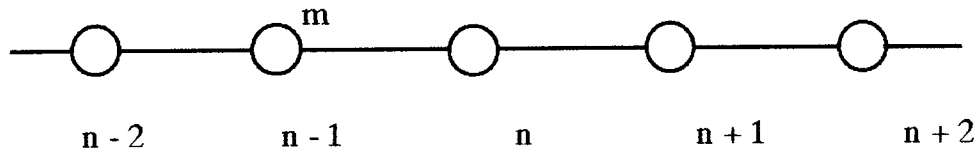
$$H = \sum_{\bar{n}, \alpha} \frac{M}{2} \dot{u}_\alpha^2(\bar{n}) + \frac{1}{4} \sum_{\bar{n}, \bar{\lambda}, \alpha, \beta} C_{\alpha\beta} [u_\alpha(\bar{n}) - u_\alpha(\bar{n} - \bar{\lambda})][u_\beta(\bar{n}) - u_\beta(\bar{n} - \bar{\lambda})] \quad (2.5)$$

Za oscilovanje atoma odgovoran je drugi član, koji u aproksimaciji najbližih suseda ima oblik:

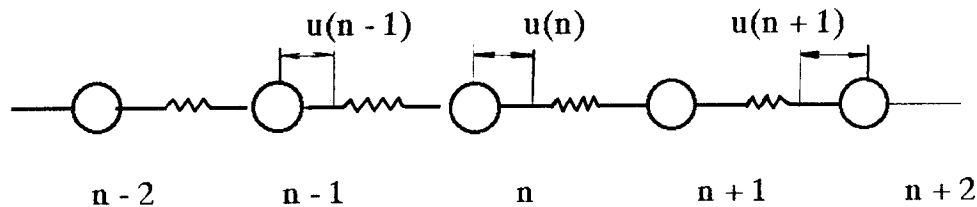
$$V_{\text{eff}} = \frac{1}{4} \sum_{\bar{n}, \bar{\lambda}} C_{\bar{n}, \bar{\lambda}} [u_{\bar{n}} - u_{\bar{n} - \bar{\lambda}}]^2$$

gde su  $C_{\bar{n}\bar{\lambda}} = C_{\alpha\beta}(\bar{n} - \bar{m})$  u slučaju  $\alpha = \beta$ .

Posmatra se jednodimenzioni niz atoma iste mase  $m$  na jednakim međusobnim rastojanjima (u stanju mirovanja).



Oni vrše male oscilacije oko svojih ravnotežnih položaja duž linije po kojoj su raspoređeni, pa se ovaj sistem može posmatrati i kao sistem međusobno povezanih linearnih harmonijskih oscilatora.



Za jednodimenzioni slučaj:

$$V_{\text{eff}} = \frac{1}{4} \sum_n \left[ C_{n-(n-1)} (u_n - u_{n-1})^2 + C_{n-(n+1)} (u_n - u_{n+1})^2 \right]$$

pri čemu je  $C_1 = C_{-1} = C$  jer zavisi samo od rastojanja između dva najbliža suseda, a ono je isto. Tada  $V_{\text{eff}}$  može da se napiše i u sledećem obliku:

$$V_{\text{eff}} = \frac{C}{4} \left[ \sum_{m+1} (u_{m+1} - u_m)^2 + \sum_m (u_m - u_{m+1})^2 \right]$$

Pošto u rešetki imamo  $N \approx 10^8$  atoma, može se zanemariti jedinica u  $\sum_{m+1}$ , pa sledi, pri  $m \rightarrow n$ :

$$V_{\text{eff}} = \frac{C}{2} \sum_n (u_n - u_{n+1})^2$$

Hamiltonijan posmatranog podsistema poprima konačan oblik:

$$H = \sum_n \frac{p_n^2}{2M} + V_{\text{eff}} \quad (2.6)$$

Hajzenbergove jednačine kretanja za  $u$  i  $p$  su:

$$i\hbar\dot{u}_m = [u_m, H]$$

$$i\hbar\dot{p}_m = [p_m, H]$$

Njihovim rešavanjem i prelazom  $m \rightarrow n$  dobija se diferencijalno-diferencnajaednačina kretanja za pomeraje  $u_n$ :

$$M\ddot{u}_n = C[u_{n-1} + u_{n+1} - 2u_n] \quad (2.7)$$

Rešenja se traže u obliku:

$$u_n = Ae^{i(nka - \omega t)}$$

odakle se za frekvencije dobija:

$$\omega(k) = \sqrt{\frac{2C}{M}} \sin\left(\frac{ak}{2}\right) \quad (2.8)$$

a) za male vrednosti ( $ka \ll 1$ ), tj. u dugotalasnoj aproksimaciji ( $\lambda \gg a$ ), biće:

$$\sin\frac{ak}{2} \approx \frac{ak}{2} \quad \text{pa je:}$$

$$\omega(k) \approx \sqrt{\frac{C}{M}} ak$$

Zavisnost frekvencije od talasnog broja je linearna.

b) za veće  $k$  ova zavisnost postaje nelinearna. Postoji maksimum iznad kojeg ni za jedno  $k$  nema oscilacija. Znači, postoji određen broj vrednosti  $k$  za koje egzistiraju oscilacije. Interval tih nezavisnih vrednosti  $k$  određen je granicama prve Brillouenove zone:

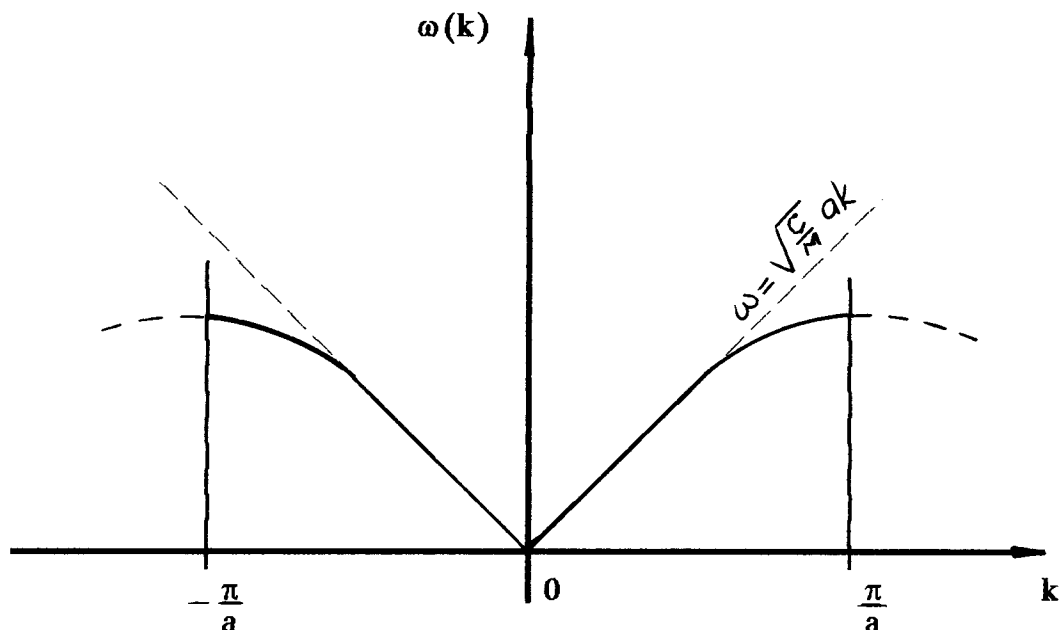
$$-\frac{\pi}{a} \leq k \leq \frac{\pi}{a}$$

Van ovog intervala zavisnost  $\omega(k)$  je periodična za svaki talas  $k'$ :

$$k' = k + \frac{2\pi}{a} m$$

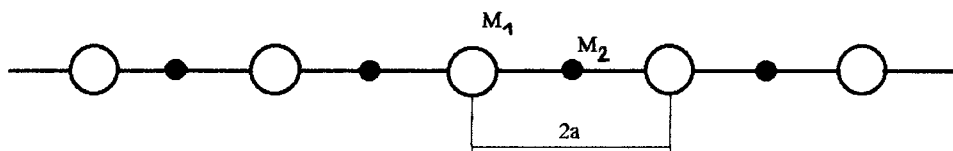
c) za velike vrednosti  $k$ , brzina talasa više nije konstantna i dolazi do odstupanja linearne zavisnosti. To je disperzija.

Na sl. 1 data je zavisnost  $\omega = \omega(k)$ :



sl. 1

Posmatrajmo sad linearni niz atoma na istim rastojanjima, a različitim masama  $M_1$  i  $M_2$ , naizmenično raspoređenim ( $M_1 > M_2$ ):



Na osnovu (2.7) jednačine kretanja  $2n$ -tog i  $(2n+1)$ -og atoma su:

$$M_1 \ddot{u}_{2n} = C(u_{2n+1} + u_{2n-1} - 2u_{2n})$$

$$M_2 \ddot{u}_{2n+1} = C(u_{2n+2} + u_{2n} - 2u_{2n+1})$$

Rešenja se traže u obliku:

$$u_n = e^{i(kna - \omega t)} \cdot \begin{cases} A, & n \text{ parno} \\ B, & n \text{ neparno} \end{cases}$$

gde su  $A$  i  $B$  amplitude oscilovanja atoma mase  $M_1$  i  $M_2$ .

Tako se za frekvencije dobija:

$$\omega_{\pm}^2(k) = C \frac{M_1 + M_2}{M_1 M_2} \left[ 1 \pm \sqrt{1 - 4 \frac{M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} \sin^2(ak)} \right] \quad (2.9)$$

Relacija (2.9) povezuje frekvenciju  $\omega$ , konstante istežanja (međuatomske sile)  $C$ , mase atoma  $M_1$  i  $M_2$ , udaljenost susednih ravnotežnih položaja  $a$  i talasni broj  $k$  i zove se disperziona relacija.

Jednačina (2.9) daje dve funkcije koje opisuju zavisnost  $\omega(k)$ . Njihovo ponašanje u dugotalasnoj aproksimaciji ( $ak \ll 1$ ) je:

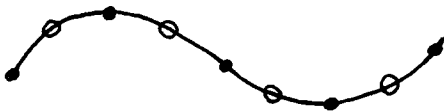
$$\omega_+^2(0) = 2C \frac{M_1 + M_2}{M_1 M_2}$$

$$\omega_-^2(k) = 2C \frac{(ak)^2}{M_1 + M_2}$$

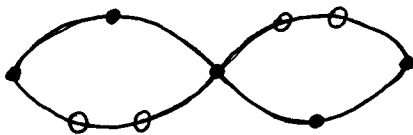
Frekvencija  $\omega_+(k)$  naziva se optičkom, a  $\omega_-(k)$  akustičkom frekvencijom.

Za optičke oscilacije karakteristično je da se atomi kreću jedan nasuprot drugom, tako da težište elementarne ćelije miruje.

Kod akustičkog rešenja atomi osciluju u fazi. Za malo  $k$  talasna dužina postaje mnogo veća od međuatomskog rastojanja i rešetka osciluje kao elastični kontinuum.

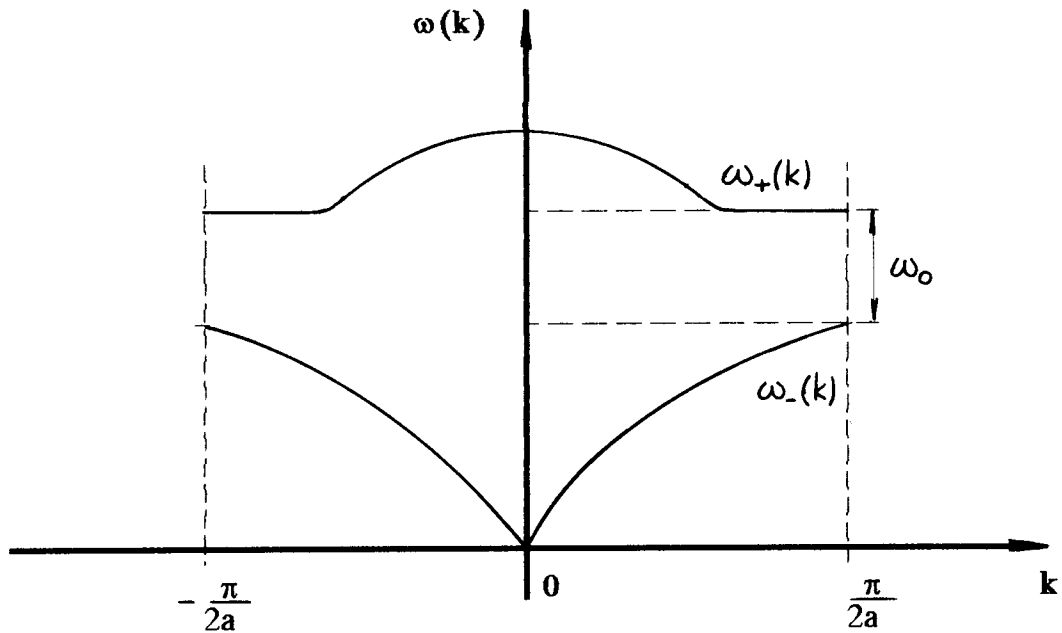


— akustičke oscilacije



— optičke oscilacije

Grafička zavisnost dva korena (2.9) u zavisnosti od talasnog broja data je na sl. 2



sl. 2

Sa porastom talasnog broja  $\omega_-(k)$  se povećava, a  $\omega_+(k)$  se smanjuje. Na granici će biti:

$$\omega_{\pm}^2\left(\frac{\pi}{2a}\right) = C \frac{M_1 + M_2}{M_1 M_2} \left[ 1 \pm \frac{|M_1 - M_2|}{M_1 + M_2} \right]$$

Po pretpostavci je  $M_1 > M_2$ , pa se dobija:

$$\omega_{+\min} = \omega_+\left(\frac{\pi}{2a}\right) = \sqrt{\frac{2C}{M_2}}$$

$$\omega_{-\max} = \omega_-\left(\frac{\pi}{2a}\right) = \sqrt{\frac{2C}{M_1}}$$

Oдавде se vidi da se maksimalna akustička frekvencija nalazi ispod minimalne optičke frekvencije, tj. postoji energetski gep koji razdvaja akustičku i optičku granu.

Širina energetskog gega je:

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{2C}{M_1}} \left( \sqrt{\frac{M_1}{M_2}} - 1 \right)$$

On je uži što je manja razlika između masa atoma i za  $M_2 \rightarrow M_1$  iščezava.

### 2.3 Trodimenzioni fononski sistemi

Posmatra se trodimenziona rešetka i pretpostavlja se da je u pitanju prosta kubna rešetka ( $a_x = a_y = a_z = a$ ) i da su torzione konstante  $C_{\alpha\beta}$  zanemarljive u odnosu na konstante istezanja  $C_{\alpha\alpha}$ .

Pomoću Hajzenbergovih jednačina dobija se tražena jednačina kretanja za pomeraje atoma oko ravnotežnog položaja (prethodno se uopštava relacija (2.7)):

$$M\ddot{u}_\alpha(\vec{n}) = \frac{1}{2} \sum_{\vec{\lambda}, \beta} C_{\alpha\beta} [u_\beta(\vec{n} + \vec{\lambda}) + u_\beta(\vec{n} - \vec{\lambda}) - 2u_\beta(\vec{n})] \quad (2.10)$$

Rešenje ovog sistema jednačina traži se u obliku ravnih talasa:

$$u_\alpha(\vec{n}) = A_\alpha(\vec{k}) e^{i(\vec{k}\vec{n} - \omega t)}$$

Dobija se homogen sistem od tri jednačine za nepoznate amplitude  $A_\alpha(\vec{k})$ :

$$\sum_{\beta} [\omega^2 \delta_{\alpha\beta} - f(\vec{k}) C_{\alpha\beta}] A_\beta(\vec{k}) = 0$$

gde je  $f(\vec{k}) = \frac{2}{M} \sum_{\vec{\lambda}} \sin^2 \frac{\vec{k}\vec{\lambda}}{2}$ .

Da bi sistem imao netrivialna rešenja, njegova determinanta mora biti jednaka nuli:

$$\det \|\omega^2 \delta_{\alpha\beta} - f(\vec{k}) C_{\alpha\beta}\| = 0 \quad (2.11)$$

Na osnovu ovog uslova, za dozvoljene frekvencije  $\omega$  postoje tri pozitivna rešenja za svaku vrednost talasnog vektora  $\vec{k}$ .

Kod izolovanog oscilatora frekvencije zavise od mase atoma i konstanti elastičnosti. Kod vezanih oscilatora, pored ovih zavisnosti, postoji i zavisnost frekvencije od talasnog vektora. Posledica ove zavisnosti je egzistencija spektra frekvencija  $\omega = \omega(\vec{k})$ .

Ako se uzmu u obzir pretpostavke sa početka poglavlja (2.3), na osnovu (2.11) dobija se zakon disperzije fonona u obliku:

$$\omega_\alpha(\vec{k}) = 2\varepsilon \sqrt{\sin^2 \frac{k_x a}{2} + \sin^2 \frac{k_y a}{2} + \sin^2 \frac{k_z a}{2}} \quad (2.12)$$

gde su:  $\varepsilon = \hbar \sqrt{\frac{C}{M}} \approx \hbar \frac{v}{a}$ ;  $C = \frac{1}{3} \sum_{\alpha} C_{\alpha\alpha}$ ;  $v = \frac{1}{3} \sum_{\alpha} v_{\alpha}$ ;  $\alpha \in (x, y, z)$



Veličine  $v_\alpha$  su brzine različitih komponenti zvučnih talasa u kristalu jer su mehaničke oscilacije sredine, ustvari, zvučni talasi koji se prostiru kroz sredinu.

Prema (2.12), u kristalima sa prostom kubnom strukturom, sve tri komponente  $\omega_\alpha(\vec{k})$  teže nuli kad  $\vec{k} \rightarrow 0$ . Takvi kvanti mehaničkih pobuđenja sa linearnim zakonom disperzije zovu se **akustički fononi**.

Pri analizi složenijih struktura, sa  $\sigma$  podrešetki, dobiće se  $3\sigma$  rešenja za dozvoljene frekvencije. Tri vrednosti teže nuli kad  $\vec{k} \rightarrow 0$  i one odgovaraju akustičkim fononima. Za ostale  $3\sigma - 3$  važi  $\lim_{\vec{k} \rightarrow 0} \omega_\alpha(\vec{k}) \neq 0$ , a mehaničke oscilacije sa ovom osobinom zovu se **optički fononi**.

Kvantnomehanički tretman u reprezentaciji druge kvantizacije, koristi isti oblik hamiltonijana kao i u predhodnom pristupu, a uvode se operatori pomeraja  $\hat{u}_{\vec{n}}$  i boze - operatori  $b^+(\vec{k})$  i  $b(\vec{k})$  koji zadovoljavaju sledeće komutacione relacije:

$$[b_i(\vec{k}), b_j^+(\vec{l})] = \delta_{\vec{k}\vec{l}} \delta_{ij}$$

$$[b_i(\vec{k}), b_j(\vec{l})] = [b_i^+(\vec{k}), b_j^+(\vec{l})] = 0$$

Dejstvo ovih operatora na vektore fononskih stanja je sledeće:

$$b(\vec{k})|n_{\vec{k}}^{(b)}\rangle = \sqrt{n_{\vec{k}}^{(b)}}|n_{\vec{k}}^{(b)} - 1\rangle$$

$$b^+(\vec{k})|n_{\vec{k}}^{(b)}\rangle = \sqrt{n_{\vec{k}}^{(b)} + 1}|n_{\vec{k}}^{(b)} + 1\rangle$$

Iz ovih relacija vidi se da operator  $b(\vec{k})$  eliminiše jednu boze-česticu (fonon), a  $b^+(\vec{k})$  stvara jednu boze-česticu. Stoga se ovi operatori nazivaju operatorima anihilacije, odnosno, kreacije fonona.

Prelaskom u reprezentaciju druge kvantizacije uvodi se unitarna transformacija kojom se hamiltonijan sistema vezanih oscilatora prevodi u hamiltonijan sistema nezavisnih oscilatora. Ova transformacija sastoji se u razvijanju operatora pomeraja po ravnim talasima sledećeg oblika:

$$\vec{u}(\vec{n}) = \sum_{i,\vec{k}} \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_j(\vec{k})}} \vec{l}_j(\vec{k}) \left[ b_j(\vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{n} - it\omega_j(\vec{k})} + b_j(\vec{k}) e^{-i\vec{k}\vec{n} + it\omega_j(\vec{k})} \right] \quad (2.13)$$

gde su:

$N = N_x N_y N_z$  – broj atoma (molekula) u elementarnoj ćeliji

$\vec{l}_j(\vec{k})$  – polarizacioni fononski vektori koji zadovoljavaju relaciju

$$\vec{l}_i(\vec{k}) \vec{l}_j(\vec{k}) = \delta_{ij} \quad ij \in (x, y, z)$$

Zamenom relacije (2.13) u (2.5) dobija se hamiltonijan fononskog sistema u dijagonalnoj formi:

$$H = \sum_{j, \vec{k}} \left[ b_j^\dagger(\vec{k}) b_j(\vec{k}) + \frac{1}{2} \right] \hbar \omega_j(\vec{k}) \quad (2.14)$$

Vidi se da izraz (2.14) predstavlja sumu hamiltonijana nezavisnih oscilatora:

$$H = \sum_{\vec{k}} H_{\vec{k}}; \quad H_{\vec{k}} = \left[ n_j(\vec{k}) + \frac{1}{2} \right] E_j(\vec{k})$$

gde su:

$n_j(\vec{k}) = b_j^\dagger(\vec{k}) b_j(\vec{k})$  - operator broja fonona

$E_j(\vec{k}) = \hbar \omega_j(\vec{k})$  - energija fonona

Pri tome, fononske frekvencije  $\omega_j(\vec{k})$  zadovoljavaju relaciju (2.12).

### **3. OSCILOVANJE ATOMA FILM - STRUKTURA SA NARUŠENOM TRANSLACIONOM SIMETRIJOM**

---

- Fononska stanja u tankim nedeformisanim filmovima
- Fononska stanja u tankim deformisanim filmovima
- Testiranje kristalnih struktura (diskretan slučaj)

### 3. OSCILOVANJE ATOMA FILM-STRUKTURA SA NARUŠENOM TRANSLACIONOM SIMETRIJOM

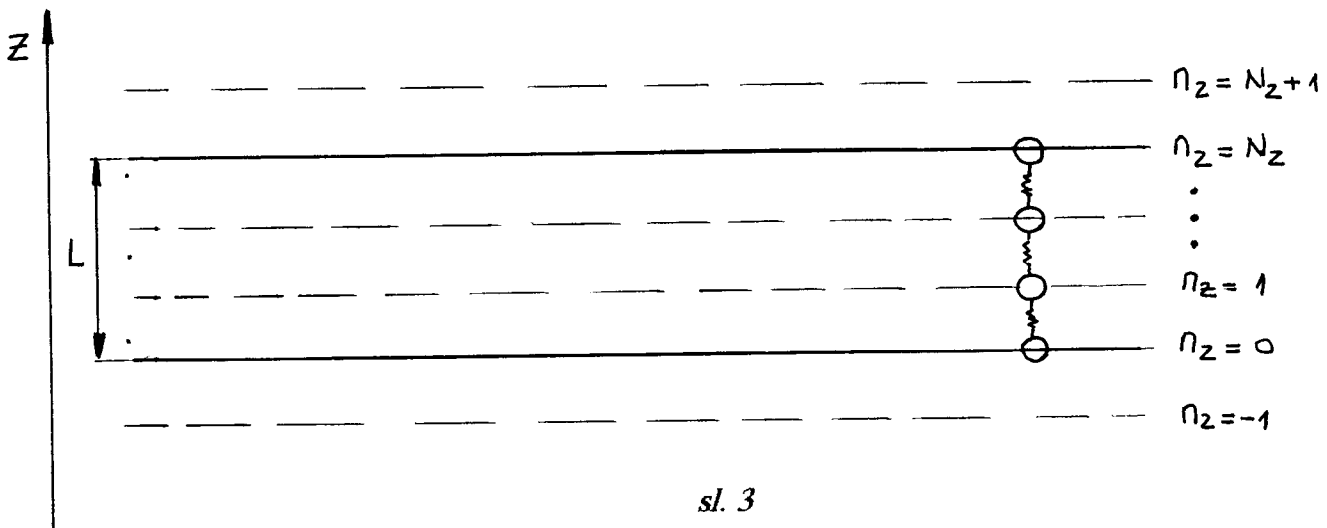
Realni kristali, za razliku od idealnih struktura, imaju granične površine. Postojanje izvesnih graničnih uslova ima za posledicu narušenje simetrije. Sistemi koji imaju dve paralelne granične površine nazivaju se *filmovima*.

#### 3.1 Fononska stanja u tankim nedeformisanim filmovima

Posmatra se tanki film koji je u XY - ravnima beskonačan, a u Z - pravcu ima konačnu debljinu. To znači da je translaciona simetrija narušena duž Z - ose. Pretpostavlja se da elementarna ćelija ima sledeće parametre:

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

Takođe se pretpostavlja da je duž Z - ose locirano  $N_z$  atoma i da su torzione konstante  $C_{\alpha\beta}$  zanemarljive u odnosu na konstante istezanja  $C_{\alpha\alpha}$ .



sl. 3

$n_z$  - indeks rešetke;  $n_z \in (0, 1, 2, \dots, N_z)$

U nedeformisanim filmovima impulsi i pomeraji atoma zavise od indeksa rešetke  $n_x, n_y, n_z$ . Zbog odsustva deformacije, mase atoma  $M$  i konstante istezanja  $C_{\alpha\alpha}$  su nezavisne od ovih indeksa.

U cilju ispitivanja ponašanja atoma ovih filmova rešavaju se atomski pomeraji pomoću hamiltonijana  $H_0$ .

Pri tome se koriste Hajzenbergove jednačine kretanja:

$$i\hbar \dot{u}_n^\alpha = [u_n^\alpha, H_0]$$

$$i\hbar \dot{p}_n^\alpha = [p_n^\alpha, H_0]$$

Dobija se sistem jednačina za pomeraje  $u_n^\alpha$ . Rešenja ovog sistema traže se u obliku proizvoda nepoznate funkcije (duž Z - ose) i harmonijske funkcije položaja (u XY ravni). Za fononske pomeraje dobija se [2]:

$$u_{\alpha, n_x, n_y, n_z}(t) = \sum_{k_x, k_y, k_z} (-1)^{n_z} \sqrt{\frac{\hbar}{MN_x N_y (N_z + 2) \omega_{\alpha, k_x, k_y, k_z}}} \cdot \left\{ b_{\alpha, k_x, k_y, k_z} e^{i[(n_x a_x k_x + n_y a_y k_y) - t \omega_{\alpha, k_x, k_y, k_z}]} + b_{\alpha, k_x, k_y, k_z}^+ e^{-i[(n_x a_x k_x - n_y a_y k_y) + t \omega_{\alpha, k_x, k_y, k_z}]} \right\} \cdot \sin[(n_z + 1) a_z k_z] e^{-it \omega_{\alpha, k_x, k_y, k_z}} \quad (3.1)$$

A za frekvencije:

$$\omega_{\alpha, k_x, k_y, k_z} = 2\Omega_{\alpha\alpha} \sqrt{\sin^2\left(\frac{a_x k_x}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{a_y k_y}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{a_z k_z}{2}\right)} \quad (3.2)$$

gde su:

$$\Omega_{\alpha\alpha} = \sqrt{\frac{C_{\alpha\alpha}}{M}}$$

$$k_z = \frac{\pi v_z}{(N_z + 2) a_z}; \quad v_z \in (1, 2, \dots, N_z + 1)$$

Na osnovu (3.2) vidi se da su mehaničke oscilacije u tankim filmovima spoj ravnih talasa u XY - ravnima i stojećih talasa u pravcu Z - ose, za razliku od idealnih struktura gde su u pitanju ravni talasi u svim smerovima.

U skladu sa (3.2), može se odrediti minimalna frekvencija oscilovanja atoma ( $k_x = k_y = 0, k_z = k_z^{\min}$ ):

$$\omega_{\min} = 2\Omega_{\alpha\alpha} \sin\left(\frac{\pi}{2(N_z + 2)}\right) \neq 0 \quad (3.3)$$

Tada je aktivaciona temperatura:

$$T_{ac} = \frac{\hbar \omega_{\min}}{k_B} = 2 \frac{\hbar}{k_B} \Omega_{\alpha\alpha} \sin\left(\frac{\pi}{2(N_z + 2)}\right) \quad (3.4)$$

Iz rezultata (3.3) vidi se da fononi u tankim filmovima imaju energetski gep  $\hbar \omega_{\min}$  na osnovu čega je i aktivaciona temperatura različita (i veća) od 0 K. Pošto je  $T_{ac}$

temperatura neophodna za eksitaciju fonona, tj. do te temperature film se ponaša kao "zamrznuta" struktura, to znači da se do ove temperature elektroni u filmu kreću idealno. Iz (3.4) vidi se da aktivaciona temperatura raste sa opadanjem debljine filma, tj. smanjenjem  $N_z$ .

### 3.2 Fononska stanja u tankim deformisanim filmovima

U ovom poglavlju biće formiran teorijski model koji se bazira na deformaciji struktura, odnosno rasporeda atoma unutar filmova. Deformacija se postiže spaterovanjem (dopingovanjem) osnovne matrice stranim atomima ili delovanjem spoljašnjeg pritiska na granične površine.

Kako se došlo na ideju da se ispituju baš ovakvi filmovi?

Rezultati nekih radova pokazali su da je aktivaciona temperatura kod superprovodnih keramika znatno viša nego kod dotad poznatih struktura. Superprovodne keramike imaju sitnozrnastu strukturu i prave se spaterovanjem i presovanjem. Njihovo otkriće dalo je ideju da adekvatnom distribucijom masa duž jednog pravca u tankim filmovima mogu biti izmenjeni fononski spektri i postignuta viša aktivaciona temperatura.

Analiza će biti vršena na kristalu proste kubne strukture, debljine  $L$  u  $Z$  - pravcu. Ovaj kristal predstavlja osnovnu matricu (sl. 3). Za konstante rešetke uzima se da je:

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

Konstanta  $a_z$  je veća od  $a_x$  i  $a_y$ , pa se zbog toga strani atomi raspoređuju duž tog pravca gde je najveće međuatomsko rastojanje, tj. najveća energetska pogodnost. Na taj način se može dobiti tražena distribucija masa duž samo jednog pravca.

U okviru ovog modela biće obrađen simetričan slučaj spaterovanja. Film se dopinguje sa obe granične površine u  $Z$  - pravcu. Ubačeni atomi obrazuju "grozdove", tj. gomilaju se oko graničnih površina, a prema sredini filma njihov broj opada. Inače, pretpostavlja se da su ubačeni atomi lakši od "domaćih" atoma.

Za atome koji pripadaju graničnim površinama pretpostavlja se da su u  $Z$  - pravcu "zamrznuti", tj. da ove površine ne predstavljaju "zid", tj. da su konstante istezanja

$C_{\alpha\alpha, N_z+1}$  i  $C_{\alpha\alpha, -1}$  različite od nule.

Hamiltonijan fononskog sistema u aproksimaciji najbližih suseda ima standardan oblik:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \bar{n}} \frac{(p_{\bar{n}}^{\alpha})^2}{M_{\bar{n}}} + \frac{1}{4} \sum_{\alpha, \bar{n}, \bar{\lambda}} C_{\bar{n}}^{\alpha\alpha} (u_{\bar{n}}^{\alpha} - u_{\bar{n}-\bar{\lambda}}^{\alpha})^2 \quad (3.5)$$

Prilikom spaterovanja ubačeni atomi se razmeštaju duž  $Z$  - ose. Zato se u tom pravcu masa osnovne matrice mora zameniti redukovanom masom. Redukovana masa će zavisiti od indeksa rešetke u  $Z$  - pravcu, ali ne i u  $X$  i  $Y$  - pravcu:

$$M_{\bar{n}} \equiv M_{n_x, n_y, n_z} = M_{n_z}$$

Isto važi i za konstante istežanja koje, zbog prisustva ubačenih atoma, takođe zavise samo od  $n_z$ :

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

Ako se posmatra  $n$  - ti atom i njegova dva najbliža suseda (sl. 4), biće

$$\sum_{\vec{\lambda}} \left[ u_{\vec{n}}^{\alpha} - u_{\vec{n}-\vec{\lambda}}^{\alpha} \right]^2 = \left( u_{\vec{n}}^{\alpha} - u_{\vec{n}-\vec{1}}^{\alpha} \right)^2 + \left( u_{\vec{n}}^{\alpha} - u_{\vec{n}+\vec{1}}^{\alpha} \right)^2$$

Hamiltonijan dobija oblik:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \vec{n}} \frac{(p_{\vec{n}}^{\alpha})^2}{M_{n_z}} + \frac{1}{4} \sum_{\alpha, \vec{n}} C_{\alpha\alpha, n_z} \left[ \left( u_{\vec{n}}^{\alpha} - u_{\vec{n}-\vec{1}}^{\alpha} \right)^2 + \left( u_{\vec{n}}^{\alpha} - u_{\vec{n}+\vec{1}}^{\alpha} \right)^2 \right]$$

On se može napisati kao zbir površinskog i zapreminskog hamiltonijana. Površinski hamiltonijan opisuje granične površine ( $n_z = 0, N_z$ ), a zapreminski unutrašnje slojeve filma. Zbog odsustva slojeva  $n_z = -1$  i  $n_z = N_z + 1$ , odgovarajući fononski pomeraji biće jednaki nuli.

$$H = H_p + H_v \quad (3.6)$$

gde  $H_p$  i  $H_v$  imaju sledeće oblike:

$$\begin{aligned} H_p = & \frac{1}{4} \sum_{\alpha, n_x, n_y} \left\{ C_{\alpha\alpha, 0} \left[ \left( u_{\alpha, n_x, n_y, 0} - u_{\alpha, n_x-1, n_y, 0} \right)^2 + \left( u_{\alpha, n_x, n_y, 0} - u_{\alpha, n_x+1, n_y, 0} \right)^2 + \right. \right. \\ & \left. \left. + \left( u_{\alpha, n_x, n_y, 0} - u_{\alpha, n_x, n_y-1, 0} \right)^2 + \left( u_{\alpha, n_x, n_y, 0} - u_{\alpha, n_x, n_y+1, 0} \right)^2 + \right. \right. \\ & \left. \left. + \left( u_{\alpha, n_x, n_y, 0} - u_{\alpha, n_x, n_y, 1} \right)^2 + \left( u_{\alpha, n_x, n_y, 0} \right)^2 \right] + \right. \\ & \left. + C_{\alpha\alpha, N_z} \left[ \left( u_{\alpha, n_x, n_y, N_z} - u_{\alpha, n_x-1, n_y, N_z} \right)^2 + \left( u_{\alpha, n_x, n_y, N_z} - u_{\alpha, n_x+1, n_y, N_z} \right)^2 + \left( u_{\alpha, n_x, n_y, N_z} - u_{\alpha, n_x, n_y-1, N_z} \right)^2 + \right. \right. \\ & \left. \left. + \left( u_{\alpha, n_x, n_y, N_z} - u_{\alpha, n_x, n_y+1, N_z} \right)^2 + \left( u_{\alpha, n_x, n_y, N_z} - u_{\alpha, n_x, n_y, N_z-1} \right)^2 + \left( u_{\alpha, n_x, n_y, N_z} \right)^2 \right] \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_v = & \frac{1}{2} \sum_{\alpha, n_x, n_y, n_z} \frac{(P_{\alpha, n_x, n_y, n_z})^2}{M_{n_z}} + \frac{1}{4} \sum_{n_z=1}^{N_z-1} C_{\alpha\alpha, n_z} \left[ (u_{\alpha, n_x, n_y, n_z} - u_{\alpha, n_x-1, n_y, n_z})^2 + \right. \\
& + (u_{\alpha, n_x, n_y, n_z} - u_{\alpha, n_x+1, n_y, n_z})^2 + (u_{\alpha, n_x, n_y, n_z} - u_{\alpha, n_x, n_y-1, n_z})^2 + \\
& \left. + (u_{\alpha, n_x, n_y, n_z} - u_{\alpha, n_x, n_y+1, n_z})^2 + (u_{\alpha, n_x, n_y, n_z} - u_{\alpha, n_x, n_y, n_z-1})^2 + (u_{\alpha, n_x, n_y, n_z} - u_{\alpha, n_x, n_y, n_z+1})^2 \right]
\end{aligned}$$

Potrebno je naći jednačinu kretanja za fononske pomeraje. Pri tome se koriste Hajzenbergove jednačine za  $u$  i  $p$ :

$$i\hbar \dot{u}_{\beta, m_x, m_y, m_z} = [u_{\beta, m_x, m_y, m_z}, H] \quad (3.7)$$

$$i\hbar \dot{p}_{\beta, m_x, m_y, m_z} = [p_{\beta, m_x, m_y, m_z}, H] \quad (3.8)$$

Pomoću komutacionih relacija:

$$[u_{\tilde{n}}^{\alpha}, p_{\tilde{m}}^{\beta}] = i\hbar \delta_{\tilde{n}\tilde{m}} \delta_{\alpha\beta}$$

$$[u_{\tilde{n}}^{\alpha}, u_{\tilde{m}}^{\beta}] = [p_{\tilde{n}}^{\alpha}, p_{\tilde{m}}^{\beta}] = 0$$

računaju se komutatori  $[u_{\beta, m_x, m_y, m_z}, H]$  i  $[p_{\beta, m_x, m_y, m_z}, H]$  i dobija se:

$$1^{\circ} \quad [u_{\beta, m_x, m_y, m_z}, H] = \frac{i\hbar}{M_{m_z}} p_{\beta, m_x, m_y, m_z} \quad (3.9)$$

2<sup>o</sup>

$$\begin{aligned}
[p_{\beta, m_x, m_y, m_z}, H] = & i\hbar \left[ C_{\beta\beta, m_z} (u_{\beta, m_x-1, m_y, m_z} + u_{\beta, m_x+1, m_y, m_z} + \right. \\
& u_{\beta, m_x, m_y-1, m_z} + u_{\beta, m_x, m_y+1, m_z} - 4u_{\beta, m_x, m_y, m_z}) + \\
& + \frac{C_{\beta\beta, m_z}}{2} (u_{\beta, m_x, m_y, m_z-1} + u_{\beta, m_x, m_y, m_z+1} - 2u_{\beta, m_x, m_y, m_z}) + \\
& + \frac{C_{\beta\beta, m_z+1}}{2} (u_{\beta, m_x, m_y, m_z+1} + u_{\beta, m_x, m_y, m_z}) + \\
& \left. + \frac{C_{\beta\beta, m_z-1}}{2} (u_{\beta, m_x, m_y, m_z-1} + u_{\beta, m_x, m_y, m_z}) \right] \quad (3.10)
\end{aligned}$$



Na osnovu toga sledi:

$$i\hbar\dot{u}_{\beta,m_x,m_y,m_z} = \frac{i\hbar}{M_{m_z}} p_{\beta,m_x,m_y,m_z} \quad (3.11)$$

Diferenciranjem relacije (3.11) po vremenu dobiće se:

$$i\hbar\ddot{u}_{\beta,m_x,m_y,m_z} = \frac{i\hbar}{M_{m_z}} \dot{p}_{\beta,m_x,m_y,m_z} = \frac{1}{M_{m_z}} [p_{\beta,m_x,m_y,m_z}, H] \quad (3.12)$$

Kombinacijom relacija (3.12) i (3.10) dobija se diferencijalno-diferencna jednačina oblika:

$$\begin{aligned} \ddot{u}_{\beta,m_x,m_y,m_z} = & \frac{C_{\beta\beta,m_z}}{M_{m_z}} (u_{\beta,m_x+1,m_y,m_z} + u_{\beta,m_x-1,m_y,m_z} - 2u_{\beta,m_x,m_y,m_z} \\ & + u_{\beta,m_x,m_y+1,m_z} + u_{\beta,m_x,m_y-1,m_z} - 2u_{\beta,m_x,m_y,m_z}) + \\ & + \frac{C_{\beta\beta,m_z}}{2M_{m_z}} (u_{\beta,m_x,m_y,m_z+1} + u_{\beta,m_x,m_y,m_z-1} - 2u_{\beta,m_x,m_y,m_z}) + \\ & + \frac{C_{\beta\beta,m_z+1}}{2M_{m_z}} (u_{\beta,m_x,m_y,m_z+1} - u_{\beta,m_x,m_y,m_z}) + \\ & + \frac{C_{\beta\beta,m_z-1}}{2M_{m_z}} (u_{\beta,m_x,m_y,m_z-1} - u_{\beta,m_x,m_y,m_z}) \end{aligned} \quad (3.13)$$

Rešenje jednačine (3.13) traže se u obliku proizvoda nepoznate funkcije u Z-pravcu i ravnih harmonijskih talasa u XY-ravnima:

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

Nalaženjem odgovarajućih izvoda i njihovim ubacivanjem u jednačinu (3.13) dobija se diferencna jednačina za amplitude  $\Phi_{\alpha,n_z}$  za  $n_z = 1, 2, \dots, N_z - 1$  (pri tom se vrše prelazi

$C_{\beta\beta} \rightarrow C_{\alpha\alpha}$ ;  $m_x, m_y, m_z \rightarrow n_x, n_y, n_z$ ):

$$\Phi_{\alpha,n_z} \left\{ \frac{4C_{\alpha\alpha,n_z}}{M_{m_z}} \left[ \sin^2\left(\frac{ak_x}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{ak_y}{2}\right) \right] - \omega^2 \right\} =$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{C_{\alpha\alpha,n_z}}{2M_{n_z}} (\Phi_{\alpha,n_z+1} + \Phi_{\alpha,n_z-1} - 2\Phi_{\alpha,n_z}) + \\
&+ \frac{C_{\alpha\alpha,n_z+1}}{2M_{n_z}} (\Phi_{\alpha,n_z+1} - \Phi_{\alpha,n_z}) + \frac{C_{\alpha\alpha,n_z-1}}{2M_{n_z}} (\Phi_{\alpha,n_z-1} - \Phi_{\alpha,n_z})
\end{aligned} \tag{3.14}$$

Za  $n_z = 0$  i  $n_z = N_z$  dobijaju se granične jednačine (3.15) i (3.16), respektivno. Pri tom se uzima da su  $\Phi_{\alpha,-1}$  i  $\Phi_{\alpha,N_z+1}$  jednake nuli, a  $C_{\alpha\alpha,-1}$  i  $C_{\alpha\alpha,N_z+1}$  različite od nule.

$$\begin{aligned}
&2\Phi_{\alpha,0} \left\{ \omega^2 M_0 - 4C_{\alpha\alpha,0} \left[ \sin^2\left(\frac{ak_x}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{ak_y}{2}\right) \right] \right\} \\
&+ C_{\alpha\alpha,0} (\Phi_{\alpha,1} - 2\Phi_{\alpha,0}) + C_{\alpha\alpha,1} (\Phi_{\alpha,1} - \Phi_{\alpha,0}) - \\
&- C_{\alpha\alpha,-1} \Phi_{\alpha,0} = 0
\end{aligned} \tag{3.15}$$

$$\begin{aligned}
&2\Phi_{\alpha,N_z} \left\{ \omega^2 M_{N_z} - 4C_{\alpha\alpha,N_z} \left[ \sin^2\left(\frac{ak_x}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{ak_y}{2}\right) \right] \right\} \\
&+ C_{\alpha\alpha,N_z} (\Phi_{\alpha,N_z-1} - 2\Phi_{\alpha,N_z}) + C_{\alpha\alpha,N_z-1} (\Phi_{\alpha,N_z-1} - \Phi_{\alpha,N_z}) - \\
&- C_{\alpha\alpha,N_z+1} \Phi_{\alpha,N_z} = 0
\end{aligned} \tag{3.16}$$

Jednačine (3.14), (3.15) i (3.16) predstavljaju sistem od  $(N_z + 1)$  diferencnih jednačina. Postupak određivanja dozvoljenih fononskih stanja na osnovu ovog sistema homogenih jednačina je veoma složen. Da bi se problem rešio vrši se prelaz na kontinuum (kontinualna aproksimacija), tj. prelaz sa diskretnih na kontinuirane variable i razvoj odgovarajućih veličina u Tajlorov red. Tada:

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

U istom cilju uvodi se i aproksimacija malih talasa ( $\bar{k} \rightarrow 0$ ), pa je:

$$\sin^2\left(\frac{ak_x}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{ak_y}{2}\right) \approx \frac{a^2 k^2}{4}; \quad k^2 = k_x^2 + k_y^2$$

U Tajlorov red razvijaju se veličine:

$$\Phi_{\alpha, n_{z\pm 1}} = \Phi_{\alpha}(z \pm a_z) = \Phi_{\alpha}(z) \mp a_z \frac{d\Phi_{\alpha}(z)}{dz} + \frac{a_z^2}{2} \frac{d^2\Phi_{\alpha}(z)}{dz^2} \mp \dots$$

$$C_{\alpha, n_{z\pm 1}} = C_{\alpha}(z \pm a_z) = C_{\alpha}(z) \mp a_z \frac{dC_{\alpha}(z)}{dz} + \dots$$

Nakon prelaska na kontinuum, zamenom diskretnih veličina kontinualnim i ubacivanjem u red razvijenih veličina, diferencna jednačina (3.14) prelazi u diferencijalnu jednačinu drugog reda:

$$\frac{d^2\Phi_{\alpha}(z)}{dz^2} + \frac{1}{C_{\alpha}(z)} \frac{d\Phi_{\alpha}(z)}{dz} \frac{dC_{\alpha}(z)}{dz} - \left[ \frac{a^2 k^2}{a_z^2} - \frac{M(z)}{C_{\alpha}(z)a_z^2} \omega^2 \right] \Phi_{\alpha}(z) = 0 \quad (3.17)$$

Već je rečeno da se masa osnovne matrice mora zameniti redukovanom masom, pa je:

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

gde su:

$\mu_m$  - masa osnovne matrice

$\mu_s$  - masa spaterovanih atoma

$n(z)$  - broj spaterovanih atoma na mestu  $z$

Pošto ubačeni atomi obrazuju "grozdove" može se pretpostaviti parabolična deformacija mase, a , s obzirom na simetričan slučaj spaterovanja, biće:

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

Koeficijenti A i B određuju se pomoću graničnih uslova. Na granicama redukovana masa je najmanja, a u centru filma postaje jednaka masi matrice:

$$M(0) = M(L) = \frac{\mu_m \mu_s}{\mu_s + n \mu_m}$$

$$M\left(\frac{L}{2}\right) = \mu_m$$

Na osnovu ovih uslova dobijaju se vrednosti za A i B, pa zavisnost redukovane mase duž Z - ose ima oblik:

$$M(z) = \mu_m - \frac{4\mu_m}{L^2} \left(1 + \frac{\mu_s}{n\mu_m}\right)^{-1} \left(z - \frac{L}{2}\right)^2 \quad (3.18)$$

Spaterovanje osnovne matrice prouzrokuje i promenu konstante rešetke  $a_z$ , pa će ona imati određenu zavisnost u Z - pravcu.

Isto važi i za konstante istezanja.

U skladu sa pretpostavljenom paraboličnom deformacijom masa, i za konstante rešetke pretpostavlja se parabolična zavisnost u Z - pravcu:

$$a(z) = C + D \left(z - \frac{L}{2}\right)^2 \quad (3.19)$$

Na osnovu graničnih uslova:

$$a(0) = a(L) = \frac{a_z}{n}$$

$$a\left(\frac{L}{2}\right) = a_z$$

određuju se nepoznati koeficijenti C i D:

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

Njihovim uvrštavanjem u relaciju (3.19) dobija se konačan oblik zavisnosti konstante rešetke u Z - pravcu:

$$a(z) = a_z \left[1 - \frac{4(n-1)}{n} \left(\frac{z}{L} - \frac{1}{2}\right)^2\right] \quad (3.20)$$

Sile koje deluju između atoma vrlo brzo opadaju sa međuatomskim rastojanjem. To automatski važi i za konstante istezanja koje opadaju sa povećanjem konstante rešetke na sledeći način:

$$C_u(z) = \frac{\text{konst.}}{a^p(z)}$$

gde je p stepen sa kojim međuatomski potencijali opadaju sa rastojanjem.

Na osnovu relacije (3.20) sledi:

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

gde je  $C_{\alpha}$  konstanta istežanja za nespaterovanu matricu.

Za velike vrednosti  $p$ , izraz u zagradi sa desne strane identiteta može se aproksimirati razvojem u red i zadržavanjem na prva dva člana:

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

Tako se za konstante istežanja konačno dobija:

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

Radi olakšavanja dalje analize koriste se usrednjene vrednosti za konstante rešetke i konstante istežanja. Usrednjavanje se vrši po debljini filma  $L$  na sledeći način:

$$\bar{a}_z = \overline{a(z)} = \frac{1}{L} \int_0^L a(z) dz$$

$$\bar{C} = \overline{C_{\alpha}(z)} = \frac{1}{L} \int_0^L C_{\alpha}(z) dz$$

Za usrednjene vrednosti integracijom se dobijaju konačni obrasci:

$$\bar{a}_z = a_z \frac{2n+1}{3n} \tag{3.21}$$

$$\bar{C} = C_{\alpha} \left( 1 + p \frac{n-1}{3n} \right)$$

Da bi se rešila diferencijalna jednačina (3.17) koristi se sledeća smena:

$$\frac{1}{2} - \frac{z}{L} = \lambda \xi$$

Na osnovu toga:

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

Ubacivanjem ovih izvoda u jednačinu (3.17) dobija se sledeća njena forma:

$$\frac{1}{\lambda^2 L^2} \frac{d^2 \Phi_\alpha(z)}{d\xi^2} + \frac{1}{C_\alpha(z)} \frac{1}{\lambda^2 L^2} \frac{d\Phi_\alpha(z)}{d\xi} \frac{dC_\alpha(z)}{d\xi} - \left( \frac{a^2 k^2}{a_z^2} - \frac{M_z}{C_\alpha(z) a_z^2} \omega^2 \right) \Phi_\alpha(z) = 0 \quad (3.22)$$

Diferencijalna jednačina koja opisuje kretanje linearnog harmonijskog oscilatora je Ermit-Weberova jednačina. Poznato je da se jednodimenzioni niz atoma posmatra kao sistem vezanih oscilatora koji se pomoću određene unitarne transformacije svodi na sistem nezavisnih oscilatora (gl. 2).

U posmatranom filmu, duž  $Z$  - pravca, atomi takođe predstavljaju sistem vezanih linearnih harmonijskih oscilatora. Zato je potrebno svesti jednačinu (3.22) na Ermit-Weberovu jednačinu.

Umesto  $a_z$  i  $C_\alpha(z)$  uzimaju se njihove srednje vrednosti:

$$a_z \rightarrow \bar{a}_z \rightarrow \bar{a}$$

$$C_\alpha(z) \rightarrow \overline{C_\alpha(z)} \rightarrow \bar{C} \Rightarrow \frac{dC_\alpha(z)}{d\xi} = 0$$

i u jednačinu (3.22) stavlja se izraz za distribuciju mase (3.18). Nakon sređivanja se dobija:

$$\Phi'' + \left[ -\frac{\lambda^2 L^2}{\bar{a}} a^2 k^2 + \frac{\lambda^2 L^2 \mu_m \omega^2}{\bar{a}^2 \bar{C}} - \frac{4L^2 \lambda^4 \mu_m \rho_M^{-1} \omega^2}{\bar{a}^2 \bar{C}} \xi^2 \right] \Phi = 0 \quad (3.23)$$

gde je:

$$\rho_M = 1 + \frac{\mu_s}{n\mu_m}$$

Da bi jednačinu (3.23) sveli na Ermit-Weberovu izraz koji množi  $\xi^2$  proglašava se za jedinicu i uvode se sledeća obeležavanja:

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

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

Njihovom upotrebom dobija se tražena Ermit-Veberova jednačina:

$$\frac{d^2\Phi}{d\xi^2} + (Q - \xi^2)\Phi = 0 \quad (3.24)$$

Napomena:

Prilikom svođenja jednačine (3.22) na jednačinu (3.24) nisu korištene granične jednačine (3.15) i (3.16). Ako se radi i sa graničnim jednačinama dobijaju se rezultati koji protivureče tačnim (eksperimentalno potvrđenim) rezultatima u diskretnoj analizi. Pošto se analizom bez upotrebe graničnih jednačina dobija slaganje rezultata kontinualne i diskretne analize, jedini izlaz je da se granične jednačine ne koriste. To se može protumačiti time da se gube razlike između jednačina pri prelazu na kontinuum i usrednjavanjima.

Da bi pomeraji atoma bili konačni, tj. da se kristal ne bi "raspao", pri proizvoljnoj debljini filma  $L$  potrebno je da  $Q$  zadovoljava sledeći uslov:

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

Ovaj uslov fizički se može protumačiti kao uslov fizičke stabilnosti kristala, a matematički kao uslov konvergenije rešenja. Na osnovu njega dobija se izraz za oscilatorne frekvencije sistema:

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

$$\omega \equiv \omega_s(q) = \frac{\bar{a}C(2s+1)}{\mu_m L \Omega} \left[ 1 + \sqrt{1 + \frac{L^2 \Omega^2 \mu_m}{(2s+1)^2 \bar{a}^2 C^2} q^2} \right] \quad (3.25)$$

Vidi se da su fononske frekvencije diskretne i da zavise od svih relevantnih parametara sistema ( $L$ ,  $n$ ,  $p$ ,  $\mu_m$ ,  $\mu_s$ ,  $a_z$ ). To su frekvencije oscilovanja atoma duž  $Z$  - pravca.

Minimalne vrednosti ovih frekvencija dobijaju se za  $q = 0$  i za  $s = 0$ :

$$\omega_0^{\min} = \frac{2\bar{a}C}{\mu_m L \Omega} \quad (3.26)$$

S obzirom da je  $L = N_z a_z$ , na osnovu obrazaca (3.21) i izraza za  $\Omega$ , sledi:

$$\omega_0^{\min} = \frac{2g}{N_z} \left( \frac{G}{\rho_M} \right)^{1/2} \sqrt{\frac{C_{aa}}{\mu_m}}$$

gde su:

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

$N_z$  - broj slojeva u kristalnoj strukturi

Sad se može izračunati aktivaciona temperatura za fonone pomoću obrasca:

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

gde je  $k_B$  Bolcmanova konstanta.

Aktivaciona temperatura, tj. minimalna temperatura za eksitaciju fonona, dobiće se za  $\alpha = z$ , jer je u Z - pravcu konstanta rešetke najveća, pa je  $C_{zz} \ll C_{xx}, C_{yy}$ .

Tada je:

$$T_{ac}(z) = \frac{\hbar}{k_B} \frac{2gG^{1/2}}{N_z \rho_M^{1/2}} \sqrt{C_{zz} \mu_m}$$

Zbog nedostatka podataka za Hukove konstante istezanja za posmatrane strukture, uzima se:

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

gde je  $v_z$  brzina zvuka u pravcu Z - ose.

Brzina zvuka  $v_z$  i konstanta rešetke  $a_z$  date su na sledeći način:

$$v_z = v_0 \cdot 10^5 \text{ cm s}^{-1}; \quad v_0 \in (1, 5)$$

$$a_z = a_0 \cdot 10^{-7} \text{ cm}; \quad a_0 = \begin{cases} \approx 1.2 & \text{za keramike} \\ 0.3 - 0.5 & \text{za metale} \end{cases}$$

Na osnovu ovih podataka dobija se konačan izraz za aktivacionu temperaturu:

$$T_{ac}(z) = \frac{\hbar}{k_B} \frac{2gG^{1/2}}{N_z \rho_M^{1/2}} 10^{12} \frac{v_0}{a_0} \text{ [K]} \quad (3.27)$$

Kod fononskih pobuđenja, u slučaju molekulskih i kovalentnih kristala najbolje odgovaraju Lenard-Džonsovi potencijali kod kojih je  $p = 12$ . Nadalje, u slučaju slabog dopinga, može se uzeti  $n = 3$ .

Analiza je izvršena za Ba-La kuprum-oksidi za koje je  $\rho_M = (0.83)^{-1}$ , prema [2].



Pomoću obrasca (3.27) i podataka za  $n$ ,  $p$  i  $\rho_M$ , mogu se izračunati aktivacione temperature za  $(N_z + 1)$ - slojne strukture i utvrditi međusobna zavisnost  $T_{ac}$  i broja slojeva, što je i bio jedan od ciljeva ovog ispitivanja.

U tabeli 1 date su izračunate brojne vrednosti aktivacionih temperatura na osnovu relacije (3.27), i to za troslojnu, petoslojnu, sedmoslojnu i devetoslojnu strukturu.

Zaključak je da aktivaciona temperatura opada sa debljinom filma. Upoređivanjem sa odgovarajućim vrednostima za nedeformisane filmove može se zaključiti da se spaterovanjem filma postiže viša aktivaciona temperatura.

Zbog prelaza na kontinuum, postoji sumnja da je pojava većeg energetskog gema kod deformisanih struktura, u odnosu na nedeformisane filmove, posledica te kontinualne aproksimacije. Zato će u sledećem paragrafu biti testirane gore navedene strukture za diskretan slučaj. U ovom slučaju, diferencna jednačina za fononske pomeraje (3.14) može se rešiti bez aproksimacija.

### 3.3 Testiranje kristalnih struktura (diskretan slučaj)

Testiranje se vrši korištenjem diferencne jednačine (3.14). Analogno kontinualnom slučaju, pretpostavlja se izraz za distribuciju mase duž  $Z$  - ose u spaterovanoj strukturi:

$$M_{n_z} = \mu_m \left[ 1 - \frac{4r}{N_z^2} \left( n_z - \frac{N_z}{2} \right)^2 \right] \quad (3.28)$$

gde su:

$$n_z = 0, 1, 2, \dots, N_z; \quad N_z - \text{paran broj (zbog simetričnog dopinga)}$$

$$r = \left( 1 + \frac{\mu_s}{n\mu_m} \right)^{-1}$$

Uzima se da je  $C_{\alpha\alpha}(z) = \text{const.} \equiv C_\alpha$ , a uvode se i sledeće oznake:

$$D = \sin^2\left(\frac{a_x k_x}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{a_y k_y}{2}\right); \quad F = 4D + 2; \quad \delta_\alpha = \frac{\omega_\alpha}{\Omega_\alpha}; \quad \Omega_\alpha^2 = \frac{C_\alpha}{\mu_m}$$

a) troslojna struktura ( $N_z = 2$ ;  $n_z = 0, 1, 2$ )

Distribucija mase je, prema relaciji (3.28):

$$M_{n_z} = \mu_m \left[ 1 - r(n_z - 1)^2 \right]$$

Na osnovu jednačine (3.14) dobija se sistem jednačina za nepoznate  $\Phi_{\alpha, n_z}$ :

$$\left[ (1 - r)\delta_\alpha^2 - F \right] \Phi_{\alpha, 0} + \Phi_{\alpha, 1} = 0; \quad n_z = 0$$

$$\begin{aligned}\Phi_{\alpha,0} + (\delta_{\alpha}^2 - F)\Phi_{\alpha,1} + \Phi_{\alpha,2} &= 0; & n_z = 1 \\ \Phi_{\alpha,1} + [(1-r)\delta_{\alpha}^2 - F]\Phi_{\alpha,2} &= 0; & n_z = 2\end{aligned}\quad (3.29)$$

Iz uslova netrivialnosti rešenja nalaze se (numeričkim putem) minimalne vrednosti za  $\delta_{\alpha}^{\min}$ , a time i za  $\omega_{\alpha}^{\min}$ :

$$\omega_{\alpha}^{\min} = \sqrt{\frac{C_{\alpha}}{\mu_m}} \delta_{\alpha}^{\min} = \sqrt{\frac{C_{zz}}{\mu_m}} G^{1/2} \delta_{\alpha}^{\min} = G^{1/2} \delta_{\alpha}^{\min} 10^{12} \frac{v_o}{a_o}$$

Da bi se dobila minimalna vrednost za frekvenciju, pri rešavanju sistema (3.29) mora se uzeti minimalna vrednost za F. U dugotalasnoj aproksimaciji ( $\vec{k} \rightarrow 0$ ),  $F = 2$ . Naravno, testira se isto jedinjenje kao i u poglavlju (3.2), pa je  $r = 0.83$ .

Tada je aktivaciona temperatura:

$$T_{ac} = \frac{\hbar}{k_B} \omega_{\alpha}^{\min} = \frac{\hbar}{k_B} G^{1/2} \delta_{\alpha}^{\min} 10^{12} \frac{v_o}{a_o} \quad (3.30)$$

**b) petoslojna struktura** ( $N_z = 4; \quad n_z = 0, 1, 2, 3, 4$ )

$$M_{n_z} = \mu_m \left[ 1 - \frac{r}{4} (n_z - 2)^2 \right]$$

Sistem jednačina za  $\Phi_{\alpha, n_z}$  glasi:

$$\begin{aligned}[(1-r)\delta_{\alpha}^2 - F]\Phi_{\alpha,0} + \Phi_{\alpha,1} &= 0; & n_z = 0 \\ \Phi_{\alpha,0} + \left[ \left(1 - \frac{r}{4}\right) \delta_{\alpha}^2 - F \right] \Phi_{\alpha,1} + \Phi_{\alpha,2} &= 0; & n_z = 1 \\ \Phi_{\alpha,1} + [\delta_{\alpha}^2 - F]\Phi_{\alpha,2} + \Phi_{\alpha,3} &= 0; & n_z = 2 \\ \Phi_{\alpha,2} + \left[ \left(1 - \frac{r}{4}\right) \delta_{\alpha}^2 - F \right] \Phi_{\alpha,3} + \Phi_{\alpha,4} &= 0; & n_z = 3 \\ \Phi_{\alpha,3} + [(1-r)\delta_{\alpha}^2 - F]\Phi_{\alpha,4} &= 0; & n_z = 4\end{aligned}$$

**c) sedmoslojna struktura** ( $N_z = 6; \quad n_z = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6$ )

$$M_{n_z} = \mu_m \left[ 1 - \frac{r}{9} (n_z - 3)^2 \right]$$

Sistem jednačina za  $\Phi_{\alpha, n_z}$  glasi:

$$\left[ (1-r)\delta_\alpha^2 - F \right] \Phi_{\alpha,0} + \Phi_{\alpha,1} = 0; \quad n_z = 0$$

$$\Phi_{\alpha,0} + \left[ \left( 1 - \frac{4}{9}r \right) \delta_\alpha^2 - F \right] \Phi_{\alpha,1} + \Phi_{\alpha,2} = 0; \quad n_z = 1$$

$$\Phi_{\alpha,1} + \left[ \left( 1 - \frac{1}{9}r \right) \delta_\alpha^2 - F \right] \Phi_{\alpha,2} + \Phi_{\alpha,3} = 0; \quad n_z = 2$$

$$\Phi_{\alpha,2} + \left[ \delta_\alpha^2 - F \right] \Phi_{\alpha,3} + \Phi_{\alpha,4} = 0; \quad n_z = 3$$

$$\Phi_{\alpha,3} + \left[ \left( 1 - \frac{1}{9}r \right) \delta_\alpha^2 - F \right] \Phi_{\alpha,4} + \Phi_{\alpha,5} = 0; \quad n_z = 4$$

$$\Phi_{\alpha,4} + \left[ \left( 1 - \frac{4}{9}r \right) \delta_\alpha^2 - F \right] \Phi_{\alpha,5} + \Phi_{\alpha,6} = 0; \quad n_z = 5$$

$$\Phi_{\alpha,5} + \left[ (1-r)\delta_\alpha^2 - F \right] \Phi_{\alpha,6} = 0; \quad n_z = 6$$

**d) devetoslojna struktura ( $N_z = 8$  ;  $n_z = 0,1,2,3,4,5,6,7,8$ )**

$$M_{n_z} = \mu_m \left[ 1 - \frac{r}{16} (n_z - 4)^2 \right]$$

Sistem jednačina za  $\Phi_{\alpha, n_z}$  glasi:

$$\left[ (1-r)\delta_\alpha^2 - F \right] \Phi_{\alpha,0} + \Phi_{\alpha,1} = 0; \quad n_z = 0$$

$$\Phi_{\alpha,0} + \left[ \left( 1 - \frac{9}{16}r \right) \delta_\alpha^2 - F \right] \Phi_{\alpha,1} + \Phi_{\alpha,2} = 0; \quad n_z = 1$$

$$\Phi_{\alpha,1} + \left[ \left( 1 - \frac{1}{4}r \right) \delta_\alpha^2 - F \right] \Phi_{\alpha,2} + \Phi_{\alpha,3} = 0; \quad n_z = 2$$

$$\Phi_{\alpha,2} + \left[ \left( 1 - \frac{1}{16} r \right) \delta_{\alpha}^2 - F \right] \Phi_{\alpha,3} + \Phi_{\alpha,4} = 0; \quad n_z = 3$$

$$\Phi_{\alpha,3} + [\delta_{\alpha}^2 - F] \Phi_{\alpha,4} + \Phi_{\alpha,5} = 0; \quad n_z = 4$$

$$\Phi_{\alpha,4} + \left[ \left( 1 - \frac{1}{16} r \right) \delta_{\alpha}^2 - F \right] \Phi_{\alpha,5} + \Phi_{\alpha,6} = 0; \quad n_z = 5$$

$$\Phi_{\alpha,5} + \left[ \left( 1 - \frac{1}{4} r \right) \delta_{\alpha}^2 - F \right] \Phi_{\alpha,6} + \Phi_{\alpha,7} = 0; \quad n_z = 6$$

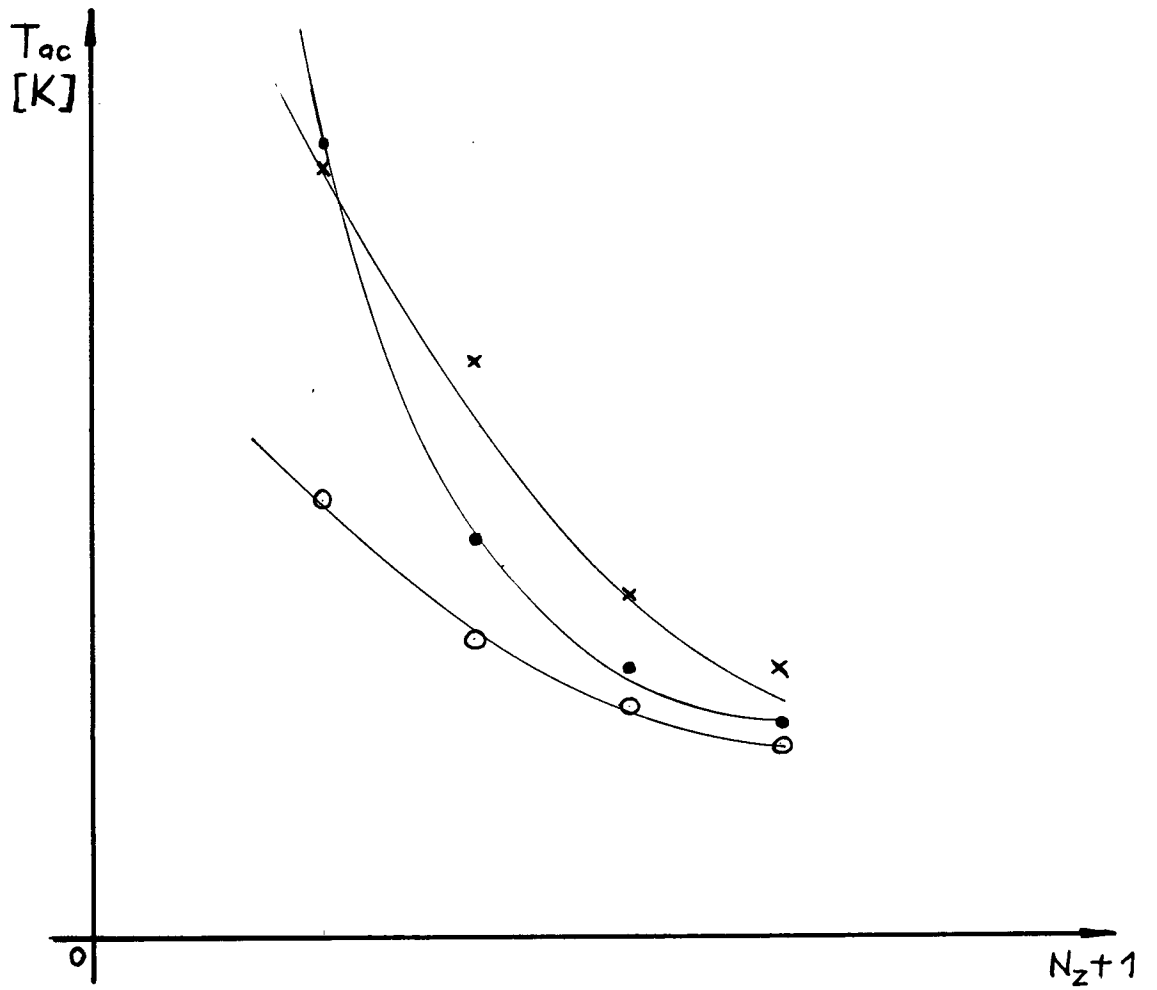
$$\Phi_{\alpha,6} + \left[ \left( 1 - \frac{9}{16} r \right) \delta_{\alpha}^2 - F \right] \Phi_{\alpha,7} + \Phi_{\alpha,8} = 0; \quad n_z = 7$$

$$\Phi_{\alpha,7} + [(1-r)\delta_{\alpha}^2 - F] \Phi_{\alpha,8} = 0; \quad n_z = 8$$

Za svaku od ovih struktura sprovodi se isti postupak kao za troslojnu. Na osnovu relacije (3.30) određuje se aktivaciona temperatura. Rezultati i poređenje sa kontinualnom aproksimacijom i nedeformisanom strukturom dati su u tabeli 1., a dat je i grafički prikaz na slici 4.

TIP STRUKTURE	$T_{ac}$ [K]			
	$N_z = 2$	$N_z = 4$	$N_z = 6$	$N_z = 8$
NEDEFORMISANA	$5.85 \frac{v_o}{a_o}$	$3.96 \frac{v_o}{a_o}$	$2.98 \frac{v_o}{a_o}$	$2.39 \frac{v_o}{a_o}$
DEFORMISANA (KONTINUALNA APROKSIMACIJA)	$10.37 \frac{v_o}{a_o}$	$5.19 \frac{v_o}{a_o}$	$3.46 \frac{v_o}{a_o}$	$2.59 \frac{v_o}{a_o}$
DEFORMISANA (DISKRETAN SLUČAJ)	$10.12 \frac{v_o}{a_o}$	$8.62 \frac{v_o}{a_o}$	$4.49 \frac{v_o}{a_o}$	$3.52 \frac{v_o}{a_o}$

Tabela 1.



Na grafiku je prikazana zavisnost aktivacione temperature od broja slojeva.

- o - nedeformisana struktura
- - deformisana struktura (kontinualna aproksimacija)
- × - deformisana struktura (diskretan slučaj)

Jasno se vidi da aktivaciona temperatura opada sa porastom broja slojeva i da se dopiranjem postiže viša aktivaciona temperatura.

Kriva za diskretan slučaj nalazi se iznad krive za kontinualnu aproksimaciju i uočljivo je njihovo relativno dobro slaganje. Niže vrednosti aktivacione temperature pri kontinualnoj aproksimaciji od istih za diskretan slučaj predstavljaju manju grešku nego da su dobijene više vrednosti.

Vidi se da, povećanjem broja slojeva, vrednosti za aktivacionu temperaturu teže ka istoj vrednosti kod sva tri tipa zavisnosti prikazanih na grafiku, i to ka vrednosti za nedeformisanu strukturu.

To znači da je kod masivnih struktura uticaj dopinga zanemarljiv.

## 4. ZAKLJUČAK

U ovom radu vršeno je ispitivanje fononskih spektara i stanja u tankim deformisanim filmovima da bi se ustanovilo da li se i pod kojim uslovima kod njih može očekivati visokotemperaturna superprovodnost.

Jedan od najvažnijih ciljeva je bio da se ispita da li su minimalne fononske frekvencije različite od nule. To bi značilo da u filmovima dolazi do eliminacije ili prigušenja akustičkih fonona, odnosno, postojanja samo fonona optičkog tipa. Posledica toga bila bi da se posmatrani film ponaša kao "zamrznuta" struktura sve do određene (aktivacione) temperature. Do ove temperature fononi su odsutni, a time je odsutna i elektron - fonon interakcija koja je npr. uzrok pojave električnog otpora ili formiranja Kuperovih parova. To znači da se sve do ove temperature elektroni (ako ih ima) u posmatranoj strukturi kreću bez otpora, tj. idealno provodno. Superprovodnost bi mogla da nastane tek iznad aktivacione temperature.

Nakon ovde sprovedene analize došlo se do sledećih zaključaka:

1. U film - strukturama mehaničke vibracije predstavljaju spoj stojećih talasa duž privilegovanog pravca (koji je normalan na granične površine) i ravnih talasa u XY - ravnima. Stojeći talasi predstavljaju kolektivno svojstvo, specifično za makroskopsko kvantnomehantičko stanje, koje je karakteristično za superprovodnike.
2. U tankom filmu sve tri akustičke frekvencije teže nekoj minimalnoj vrednosti koja zavisa od debljine filma. To znači da za pobuđivanje fonona treba uložiti određenu energiju - postoji energetski gep. Njegovo postojanje rezultira određenom aktivacionom temperaturom do koje se film ponaša kao "zamrznuta" struktura.
3. Aktivaciona temperatura zavisi od debljine filma, tj. od broja slojeva i to tako što raste sa njihovim smanjenjem. U vrlo tankim filmovima ova temperatura je relativno visoka.

Analizom tankih deformisanih filmova i upoređivanjem sa idealnim strukturama i nedeformisanim filmovima mogu da se izvedu sledeći zaključci:

1. Iz dobijenog frekventnog spektra fonona vidi se da nijedna od frekvencija ne teži nuli kad talasni vektor teži nuli, tj. primenjena masena deformacija i postojanje graničnih površina ne dopuštaju pojavu akustičnih fonona.
2. Dopingom se poboljšavaju superprovodne osobine, tj. postiže se viša aktivaciona temperatura u odnosu na nedeformisane filmove. Ova temperatura zavisi od načina spaterovanja (distribucije masa) i broja spaterovanih atoma.
3. Razlike u fononskim spektrima između idealnih i film - struktura smanjuju se sa povećanjem debljine filma i kad  $N_z \rightarrow \infty$ , one nestaju.



## 5. LITERATURA

- [1] - B. S. Tošić, Statistička fizika, PMF IF, Novi Sad 1978.
- [2] - M. Pantić, Fononska stanja u strukturama sa narušenom simetrijom, PMF FF, Beograd 1993.
- [3] - I. Supek, Teorijska fizika i struktura materije - II dio, Školska knjiga, Zagreb 1990.
- [4] - C. Kittel, Uvod u fiziku čvrstog stanja, Savremena administracija, Beograd 1970.
- [5] - A. С. Давидов, Теория твердого тела, Наука, Москва 1976.
- [6] - B. S. Tošić, J. P. Šetrajić, R. P. Đajić and D. Lj. Mirjanić, Phys. Rev. B 36 (1987) 9094
- [7] - Đ. Mušicki, Uvod u teorijsku fiziku I (teorijska mehanika), ICS, Beograd 1985.