

UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET
INSTITUT ZA FIZIKU

УНИВЕРЗИТЕТ У НОВОМ САДУ
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ

ПРИМЉЕНО:	29 ЈУН 2000
ОРГАНИЗ.ЈЕД.	БРОЈ
0603	9/161

- DIPLOMSKI RAD -

ELEKTRONSKI SPEKTRI
U KVANTNIM ŽICAMA

MENTOR
PROF.DR JOVAN ŠETRAJČIĆ

KANDIDAT
Svetlana Pelemiš

Novi Sad, 2000. godine

Sadržaj

1	Uvod	3
2	Elektroni u kristalima	4
2.1	Model kvazislobodnih elektrona	4
2.1.1	Energetske zone	4
2.1.2	Brzina, ubrzanje i efektivna masa	7
2.1.3	Statistika kvazislobodnih nosilaca	8
2.2	Elektroni u neograničenim strukturama	9
2.2.1	Elektronski hamiltonijan	9
2.2.2	Jednačine kretanja i zakon disperzije	9
2.3	Elektroni u film-strukturama	11
2.3.1	Modelni hamiltonijan	11
2.3.2	Zakon disperzije	14
3	Elektroni u kvantnim žicama	16
3.1	Modelni hamiltonijan	17
3.2	Jednačina kretanja	18
3.3	Zakon disperzije	22
4	Zaključak	26
5	Literatura	27

1 U v o d

Jedan od važnijih pravaca istraživanja u savremenoj fizici kondenzovane materije predstavljaju teorijska i eksperimentalna istraživanja osobina niskodimenzionih sistema - makroskopskih kvantnih struktura (superrešetke, ultratanki filmovi, kvantne žice i kvantne tačke)[1]. Kod ovih struktura, najvažnije je precizno strukturiranje materijala do dimenzija reda veličine nanometara, u polju elektronike, optoelektronike i visokotemperaturske superprovodnosti. Fenomeni povezani sa tako malim dimenzijama dovode do specifičnih pojava i izmenjenih osobina materijala [2].

Veoma je značajno ispitivanje udela i uticaja elektronskog podsistema na fizičke karakteristike materijala, jer su elektroni nosioci svih transportnih i mnogih drugih fizički interesantnih procesa [3,4].

U ovom radu analizirani su elektronski spektri u kvantnim žicama. Istražen je uticaj postojanja granica na energetski spektar i moguća stanja elektrona. Analiza je vršena metodom dvovremenskih temperaturnih Grinovih funkcija koji se danas veoma često koristi u kvantnoj teoriji čvrstog stanja [4].

Da bi se izučile posebnosti karakteristika elektrona u kvantnim žicama, u glavi 2 su spomenute te iste karakteristike u neograničenim kristalnim strukturama i tankim filmovima, i na osnovu toga je izvršeno poredjenje ovih struktura.

2 Elektroni u kristalima

Translaciona invarijantnost idealnih kristalnih struktura [1,2] nameće periodičan (sa periodom kristalne rešetke) oblik mnogim fizičkim veličinama koje ih opisuju (npr. periodična raspodela polja i potencijalne energije elektrona).

Jedan od glavnih zadataka teorije čvrstog stanja je proučavanje promena diskretnog energetskog spektra elektrona izolovanog atoma - pri približavanju atoma i obrazovanju kristalne strukture. U ovom procesu periodično polje kristala i interakcija među atomima dovodi do cepanja energetskih nivoa elektrona slobodnih atoma. Pošto se kristal može tretirati kao gigantski molekul, to kvantna stanja elektrona u tom molekulu, zbog Paulijevog principa isključenja, moraju biti okarakterisana različitim kvantnim brojevima što ima za posledicu formiranje čitavog spektra energetskih nivoa na mestu jednog nivoa u izolovanom atomu [5-7]. Umesto jednog energetskog nivoa, jednakog za svih N izolovanih atoma, u čvrstom telu se pojavljuje N blisko rasporedjenih nivoa, koji obrazuju energetsku zonu. Cepanje energetskih nivoa je najizrazitije za spoljašnje (valentne) nivoe, jer se talasne funkcije spoljašnjih valentnih elektrona susednih atoma medjusobno veoma preklapaju, dovodeći do kolektiviziranosti ovih stanja, kojima se na taj načina atomi povezuju u kristal - gigantski molekul.

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

2.1 Model kvazislobodnih elektrona

Veliki broj važnih fizičkih osobina mogu se razumeti polazeći od modela slobodnih elektrona po kome se najslabije vezani elektroni atoma kreću slobodno po zapremini metala. Valentni elektroni postaju provodnici elektriciteta i nazivaju se provodni elektroni. Sile izmedju provodnih elektrona i jona se zanemaruju, tj. smatra se da se provodni elektroni mogu kretati svuda u unutrašnjosti uzorka. Ukupna energija je jednaka kinetičkoj, što znači da se potencijalna ne uzima u obzir [5-7]. Klasična teorija je imala nekoliko uspeha, ali i nedostataka. U uspehe spadaju izvodjenje Omovog zakona ($\vec{j} = \sigma \vec{E}$) i izvodjenje veze izmedju električne i toplotne provodnosti. Međutim, totalni neuspeh je doživelja u objašnjenju toplotnog kapaciteta i paramagnetske susceptibilnosti provodnih elektrona. Zatim, pomoću klasične teorije ne može da se objasni postojanje dugog slobodnog puta elektrona. Pomenute pojave uspešno se opisuju pomoću modela kvazislobodnih elektrona.

2.1.1 Energetske zone

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

Dozvoljene vrednosti energije slobodnog elektrona se protežu neprekidno od nula do beskonačno:

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

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

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

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

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

Oblasti vrednosti talasnog vektora k pri kojima se energija elektrona E menja neprekidno, a na granicama doživljava prekid, nazivaju se Briluenovim zonama. Oblast u k -prostoru izmedju $-\frac{\pi}{a}$ i $+\frac{\pi}{a}$ se naziva prvom Briluenovom zonom. Zbog periodičnosti kristala fizički su neekvivalentne samo tačke recipročnog k -prostora koje pripadaju prvoj Briluenovoj zoni, dok su fizički ekvivalentne sve vrednosti talasnog vektora \vec{k}' i \vec{k} koje se razlikuju za vektor translacije recipročne rešetke \vec{K} : $\vec{k}' = \vec{k} + \vec{K}$, gde \vec{k} pripada prvoj Briluenovoj zoni. U jednodimenzionom slučaju intenzitet vektora \vec{K} je celobrojni umnožak intenziteta primitivnog vektora recipročne rešetke [1,3,7], pa se stanja elektrona sa vrednostima talasnog vektora inteziteta k i talasnih vektora inteziteta k' ($\vec{k}' = \vec{k} + n \frac{2\pi}{a}, n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$) fizički ne razlikuju. To daje mogućnost da se sve Briluenove zone svedu na prvu zonu.

Za kristal konačnih dimenzija Born-Karmanovi ciklični uslovi [1,3,7] daju diskrete¹ vrednosti kvazitalasnog vektora unutar prve Briluenove zone:

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

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

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

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

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

Širina dozvoljene zone se može proceniti pomoću Hajzenbergove relacije neodredjenosti:

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

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

U toku obrazovanja čvrstog tela elektroni se kolektiviziraju prolazeći kroz potencijalne barijere tunel efektom. Prozračnost² pravougaone barijere se procenjuje kao [5]:

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

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

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

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

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

Srednje vreme pripadanja elektrona datom atomu je

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

tako da se za širinu dozvoljenih zona dobija

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

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

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

Prema veličini energetskog procepa materijali se dele na provodne i na neprovodne [5]. Provodni materijali imaju nezauzete energetske nivoе koji leže neposredno iznad zauzetih valentnih nivoa. Postoje dve vrste provodnika:

²Relativni odnos propuštenog i upadnog elektronskog fluenta.

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

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

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

2.1.2 Brzina, ubrzanje i efektivna masa

Kako kvazislobodni elektroni u metalu čine degenerisan gas, odnosno, podvrgavaju se kvantnoj Fermi-Dirakovoј statistici, potrebno je napustiti klasičnu predstavu elektrona kao čestice i posmatrati njegovu dualnu (čestično-talasnu) kvantomehaničku prirodu [4-6].

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

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

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

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

pa se na osnovu toga dobija izraz za ubrzanje elektrona:

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

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

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

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

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

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

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

Smisao uvodjenja 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 ureačunato 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 (2.14) koje se menjaju pomeranjem elektronskog stanja u prostoru talasnog vektora. Efektivna masa elementarnih nosioca naelektrisanja je pozitivna oko sredine, a negativna pri kraju redukovanih područja.

Ove anomalne oblasti ($m^* < 0$) mogu da se objasne posmatrajući kretanje elektrona pod dejstvom konstantnog spoljašnjeg električnog polja \vec{E} . Ako je pre uključenja polja \vec{E} njegova energija bila jednaka nuli (tj. nalazi se u centru Briluenove zone), posle priključenja \vec{E} , na elektron počinje da deluje konstantna sila $-e\vec{E}$, pa kvaziimpuls elektrona linearno raste sa vremenom. Svaki put kada elektron dostigne granicu Briluenove zone $k = +\pi/a$ njegov kvaziimpuls se skokovito menja u suprotni ($k = -\pi/a$). Takvu skokovitu promenu doživljava i brzina elektrona: pozitivnim vrednostima brzine odgovara kretanje elektrona u pravcu delovanja sile, a negativnim nasuprot delovanju te sile. Dakle, kretanje elektrona u kristalu ima oscilatori 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 ($-\pi/a < k < -k'$). Međutim, 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 [5].

2.1.3 Statistika kvazislobodnih nosilaca

Raspodela elektrona u kristalu po energijama, pri nekoj temperaturi T , pokorava se Fermi-Dirakovoj statistici [5,7]:

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

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

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

Temperatura pridružena Fermijevoj energiji naziva se temperatura degeneracije. Elektronski gas je degenerisan u području gde važi : $T \leq T_F$. Sa porastom temperature jedan deo elektrona se pobudi i prelazi na više energetske nivoje. Verovatnoća nalaženja elektrona na nižim nivoima $E < E_F$ se smanji, ali se za isto toliko poveća verovatnoća nalaženja elektrona na višim nivoima

$E > E_F$. Granica popunjenoosti se rasplinjava za veličinu $k_B T$. Za sve temperature iznad apsolutne nule uvek važi $f(E_F) = \frac{1}{2}$.

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

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

2.2 Elektroni u neograničenim strukturama

Ovde će se naći elektronski zakon disperzije metodom Grinovih funkcija.

2.2.1 Elektronski hamiltonijan

Sada će se razmotriti neka svojstva elektronskog podsistema idealnog beskonačnog kubnog kristala polazeći od hamiltonijana kvazislobodnih elektrona koji u konfiguracionom prostoru i harmonijskoj aproksimaciji ima oblik [4,7]:

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

gde su $a_{\vec{n}}^+$ i $a_{\vec{n}}$ - kreacioni i anihilacioni operatori elektrona na čvoru \vec{n} rešetke. Veličina $\Delta_{\vec{n}}$ - predstavlja energiju elektrona lokalizovanog na čvoru \vec{n} , a veličine $W_{\vec{n}, \vec{m}}$ - su matrični elementi elektronskog transfera sa čvora \vec{n} na čvor \vec{m} . Ovde je 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 (2.18) ekvivalentan hamiltonijanu elektronskog gasa u aproksimaciji efektivne mase:

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

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

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

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

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

2.2.2 Jednačine kretanja i zakon disperzije

Svojstva posmatranog elektronskog sistema biće analizirana pomoću antikomutatorske Grinove funkcije [4,7]

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

koja zadovoljava jednačinu kretanja:

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

Nakon izračunavanja komutatora $[a_{\vec{n}}, H]$ pri čemu su korišćene standardne fermionske komutatorske relacije:

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

jednačina kretanja (2.23) dobija oblik:

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

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

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

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

Zamenom u jednačinu (2.25) kretanja dobija se:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi N} \sum_{\vec{k}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})-i\omega t} \left\{ -i\hbar + 2\pi [\hbar\omega - \Delta + W (e^{+iak_x} + e^{-iak_x}) + \right. \\ \left. + W (e^{+iak_y} + e^{-iak_y} + e^{+iak_z} + e^{-iak_z})] G_{\vec{k}}(\omega) \right\} = 0, \end{aligned} \quad (2.28)$$

odnosno:

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

odakle dalje sledi:

$$G_{\vec{k}}(\omega) = \frac{i}{2\pi} \frac{1}{\omega - \omega_{\vec{k}}} \equiv \frac{i\hbar}{2\pi} \frac{1}{E - E_{\vec{k}}}, \quad (2.29)$$

gde

$$E_{\vec{k}} = \hbar \omega_{\vec{k}} = \Delta - 2W (\cos ak_x + \cos ak_y + \cos ak_z) \quad (2.30)$$

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

$$E_{\vec{k}} \equiv \frac{E_{\vec{k}}}{4W} = \sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y}{2} + \sin^2 \frac{ak_z}{2}. \quad (2.31)$$

2.3 Elektroni u film-strukturama

Istom metodom kao kod neograničenih kristalnih sistema može se doći do zakona disperzije u film-strukturama³.

2.3.1 Modelni hamiltonijan

Hamiltonijan vezanih elektrona u tankim kristalnim filmovima možemo formirati polazeći od „balkovskog” hamiltonijana (2.18), odnosno (2.21), koji u aproksimaciji najbližih suseda ima razvijeni oblik:

$$\begin{aligned} H = & \sum_{n_x n_y n_z} \Delta_{n_x n_y n_z} a_{n_x n_y n_z}^+ a_{n_x n_y n_z} - \sum_{n_x n_y n_z} a_{n_x n_y n_z}^+ \times \\ & \times (W_{n_x n_y n_z; n_x+1, n_y, n_z} a_{n_x+1, n_y, n_z} + W_{n_x n_y n_z; n_x-1, n_y, n_z} a_{n_x-1, n_y, n_z} + \\ & + W_{n_x n_y n_z; n_x n_y+1, n_z} a_{n_x n_y+1, n_z} + W_{n_x n_y n_z; n_x n_y-1, n_z} a_{n_x n_y-1, n_z} + \\ & + W_{n_x n_y n_z; n_x n_y n_z+1} a_{n_x n_y n_z+1} + W_{n_x n_y n_z; n_x n_y n_z-1} a_{n_x n_y n_z-1}) . \end{aligned} \quad (2.32)$$

Pošto su granične površine filma uzete normalno na z - pravac, indeks sloja n_z u (2.32) - uzima vrednosti $n_z = 0, 1, 2, \dots, N_z$, gde je $N_z \in [2, 20]$ kod ultratankih filmova. Indeksi n_x i n_y , koji određuju položaj atoma u svakom sloju mogu imati proizvoljne celobrojne vrednosti (praktično, od $-\infty$, do $+\infty$).

Za razliku od idealnih beskonačnih struktura, realni kristali ne poseduju osobinu translacione invarijantnosti. Postojanje izvesnih graničnih uslova, jedan je od uzroka narušenja simetrije. Sistemi koji imaju dve paralelne granične površine nazivaju se filmovima. Posmatra se idealni tanki film kubne kristalne strukture, načinjen na substratu nekim tehničko-tehnološkim postupkom (naparavanjem, spaterovanjem i sl.). Pojam idealni film koristi se u smislu nenarušenja kristalne strukture (bez prisustva defekata, primesa i sl.), a ne u smislu prostorne neograničenosti. Dimenzije filma su takve da je on u XY ravnima beskonačan, a u z pravcima ima konačnu deblinu (L). Znači da ovaj film poseduje dve beskonačne granične površine paralelne XY ravnima i to za: $z = 0$ i $z = L$ (slika 2.1).

Zbog postojanja granica uzima se da su površinski energetski parametri elektronskog filma oblika:

$$\begin{aligned} \Delta_{n_x n_y n_z} &= 0 & \text{za } n_z < 0 \text{ i } n_z > N_z , \\ \Delta_{n_x n_y n_z} &= \Delta & \text{za } 1 \leq n_z \leq N_z - 1 , \\ \Delta_{n_x n_y 0/N_z} &= \Delta(1 + \varepsilon_{1/2}) & \text{za } 1 \leq n_z \leq N_z - 1 , \end{aligned} \quad (2.33)$$

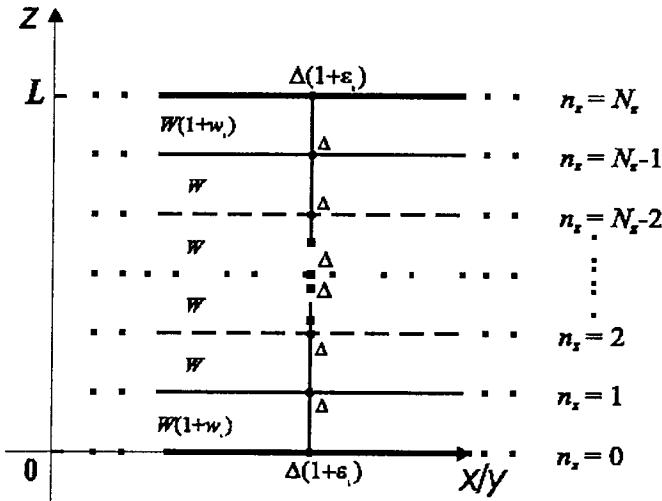
$$\begin{aligned} W_{n_x n_y 0; n_x n_y n_z} &= 0 & \text{za } n_z < 0 , \\ W_{n_x n_y N_z; n_x n_y n_z} &= 0 & \text{za } n_z > N_z , \\ W_{n_x n_y n_z; n_x n_y, n_z+1} &= W & \text{za } 1 \leq n_z \leq N_z - 1 , \\ W_{n_x n_y 0; n_x n_y, 1} &= W(1 + w_1) , & W_{n_x n_y N_z-1; n_x n_y, N_z} = W(1 + w_2) ; \end{aligned} \quad (2.34)$$

pri čemu je za svaki sloj,

$$W_{n_x n_y n_z; n_x \pm 1, n_y n_z} = W_{n_x n_y n_z; n_x n_y, \pm 1, n_z} \equiv W , \quad (2.35)$$

gde je W - konstanta elektronskog transfera idealnog kristala.

³Filmovi predstavljaju beskonačne strukture u svim kristalnim ravnima paralelnim dvema graničnim površima, koje su normalne na jedan prioritetan pravac u prostoru, duž koga je posmatrani sistem ograničen.

Slika 2.1: Presek modela kristalnog filma u $X(Y)Z$ ravni

Elektronski hamiltonijan tankih kristalnih filmova možemo sada napisati u obliku:

$$H = H_z + H_p ,$$

$$\begin{aligned}
 H_z &= \sum_{m_x m_y} \sum_{m_z=2}^{N_z-2} a_{m_x m_y m_z}^+ [\Delta a_{m_x m_y m_z} - W (a_{m_x+1, m_y, m_z} + a_{m_x-1, m_y, m_z} + \\
 &+ a_{m_x m_y+1, m_z} + a_{m_x m_y-1, m_z} + a_{m_x m_y, m_z+1} + a_{m_x m_y, m_z-1})] ; \\
 H_p &= \sum_{m_x m_y} \left\{ a_{m_x m_y 0}^+ [(1+\varepsilon_1)\Delta a_{m_x m_y 0} - (1+w_1)W a_{m_x m_y 1} - \right. \\
 &- W(a_{m_x+1, m_y, 0} + a_{m_x-1, m_y, 0} + a_{m_x m_y+1, 0} + a_{m_x m_y-1, 0})] + \\
 &+ a_{m_x m_y 1}^+ [\Delta a_{m_x m_y 1} - W a_{m_x m_y 2} - (1+w_1)W a_{m_x m_y 0} - \\
 &- W(a_{m_x+1, m_y, 1} + a_{m_x-1, m_y, 1} + a_{m_x m_y+1, 1} + a_{m_x m_y-1, 1})] + \\
 &+ a_{m_x m_y, N_z-1}^+ [\Delta a_{m_x m_y, N_z-1} - W a_{m_x m_y, N_z-2} - (1+w_2)W a_{m_x m_y, N_z} - \\
 &- W(a_{m_x+1, m_y, N_z-1} + a_{m_x-1, m_y, N_z-1} + a_{m_x m_y+1, N_z-1} + a_{m_x m_y-1, N_z-1})] + \\
 &+ a_{m_x m_y, N_z}^+ [(1+\varepsilon_2)\Delta a_{m_x m_y, N_z} - (1+w_2)W a_{m_x m_y, N_z-1} - \\
 &\left. - W(a_{m_x+1, m_y, N_z} + a_{m_x-1, m_y, N_z} + a_{m_x m_y+1, N_z} + a_{m_x m_y-1, N_z})] \right\} \quad (2.36)
 \end{aligned}$$

Pomoću tako definisanog hamiltonijana, mogu se izračunati jednočestične antikomutatorske Grinove funkcije⁴ (2.22) sličnom mikroteorijskom procedurom kao kod neograničenih kristala. Razlika je u tome što se ovde vrši vremenska i delimična prostorna Furije transformacija. Prostorna Furije-transformacija mora biti delimična $(n_x n_y n_z) \rightarrow (k_x, k_y, n_z)$ jer je posmatrani sistem ograničen duž z -pravca:

$$G_{n_x n_y n_z; \vec{m}}(t) = \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i[k_x a_x(n_x - m_x) + k_y a_y(n_y - m_y)]} e^{-i\omega t} G_{n_z; m_z}(k_x, k_y, \omega) \quad (2.37)$$

⁴Grinove funkcije određuju ravnotežna svojstva elektrona u tankim kristalnim filmovima [4].

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

(gde je: $n_z = 0, 1, 2, \dots, N_z$ i $a_x = a_y = a$), te zamenom gornjih transformacija u jednačinu kretanja (2.25) dobija se sistem jednačina [8-10]:

$$\begin{aligned} (\varrho - \varepsilon_1) G_0 + (1 + w_1) G_1 &= \mathcal{K}_0 \\ (1 + w_1) G_0 + \varrho G_1 + G_2 &= \mathcal{K}_1 \\ G_1 + \varrho G_2 + G_3 &= \mathcal{K}_2 \\ &\vdots && \vdots \\ G_{n_z-1} + \varrho G_{n_z} + G_{n_z+1} &= \mathcal{K}_{n_z} \\ &\vdots && \vdots \\ G_{N_z-3} + \varrho G_{N_z-2} + G_{N_z-1} &= \mathcal{K}_{N_z-2} \\ G_{N_z-2} + \varrho G_{N_z-1} + (1 + w_2) G_{N_z} &= \mathcal{K}_{N_z-1} \\ (1 + w_2) G_{N_z-1} + (\varrho - \varepsilon_2) G_{N_z} &= \mathcal{K}_{N_z} \end{aligned} \quad (2.38)$$

pri čemu su uvedene oznake:

$$\begin{aligned} \varrho &= \hbar \frac{\omega}{W} - \frac{\Delta}{W} + 2(\cos ak_x + \cos ak_y); \\ G_{n_z, m_z}(k_x, k_y; \omega) &\equiv G_{n_z}; \quad \mathcal{K}_{n_z} = \frac{i\hbar}{2\pi W} \delta_{n_z, m_z} \end{aligned} \quad (2.39)$$

(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:

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

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

U cilju 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:

$$\mathcal{D}_{N_z+1} \equiv 0. \quad (2.40)$$

Za analitičko-rešiv slučaj ($\varepsilon_{1/2} = 0$, $w_{1/2} = 0$) determinanta sistema (2.38) ima oblik:

$$\mathcal{D}_{N_z+1}(\varrho) = \begin{vmatrix} \varrho & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & \varrho & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \varrho & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & \varrho & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & \varrho & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & \varrho \end{vmatrix}_{N_z+1} \quad (2.41)$$

i može da se napiše u razvijenoj formi:

$$\mathcal{D}_{N_z+1}(\varrho) = \varrho^2 \mathcal{P}_{N_z-1} - 2\varrho \mathcal{P}_{N_z-2} + \mathcal{P}_{N_z-3}, \quad (2.42)$$

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

2.3.2 Zakon disperzije

Uporedjujući gornju determinantu sa Čebiševljevim polinomima vidi se da je:

$$\mathcal{D}_{N_z+1}(\varrho) = \mathcal{P}_{N_z+1}(\zeta) = \frac{\sin(N_z + 2)\zeta}{\sin \zeta}; \quad \varrho = 2 \cos \zeta. \quad (2.43)$$

Iz uslova (2.40), tj. za $\mathcal{P}_{N_z+1} \equiv 0$, dobija se:

$$\zeta_\mu = \frac{\pi \mu}{N_z + 2}; \quad \mu = 1, 2, 3, \dots, N_z + 1. \quad (2.44)$$

Na osnovu ovoga i jednačine (2.39) nalazi se:

$$\hbar \omega_\mu = \Delta - 2W (\cos ak_x + \cos ak_y - \cos \zeta_\mu), \quad (2.45)$$

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

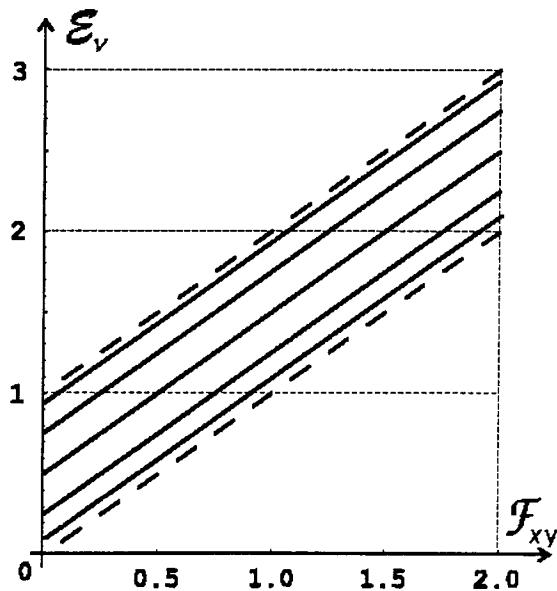
$$k_z(\nu) = \frac{\pi}{a} \frac{\nu}{N_z + 2}; \quad \nu = 1, 2, 3, \dots, N_z + 1. \quad (2.46)$$

Zamenom ovih relacija u (2.42) i uzimajući u obzir da je $E_{\vec{k}}(\nu) = \hbar\omega_\nu$ i $\Delta = 6W$, sledi:

$$\mathcal{E}_{\vec{k}}(\nu) \equiv \mathcal{F}_{k_x k_y} + \mathcal{G}_{k_z}(\nu), \quad (2.47)$$

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

Izraz (2.47) predstavlja zakon disperzije slabo vezanih elektrona u filmu i ima istu formu kao izraz (2.31) dobijen za idealne neograničene strukture, s razlikom što je tamo k_z praktično kontinualno promenljivo (u intervalu $[0, \pi/a]$)⁵ kao što su k_x i k_y , a ovde je diskretno - dato izrazom (2.46).



Slika 2.2: Zakon disperzije u tankom filmu

⁵Posmatramo samo „desnu” polovinu spektra ($k_j \geq 0$, $j = x, y, z$) znajući da je on ogledalski simetričan.

Pored toga, uočava se da je:

$$k_x^{min} = k_y^{min} = 0 ; \quad k_z^{min} = \frac{\pi}{a} \frac{1}{N_z + 2} > 0 , \quad (2.48)$$

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

$$k_x^{max} = k_y^{max} = \frac{\pi}{a} ; \quad k_z^{max} = \frac{\pi}{a} \frac{N_z + 1}{N_z + 2} < \frac{\pi}{a} . \quad (2.49)$$

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

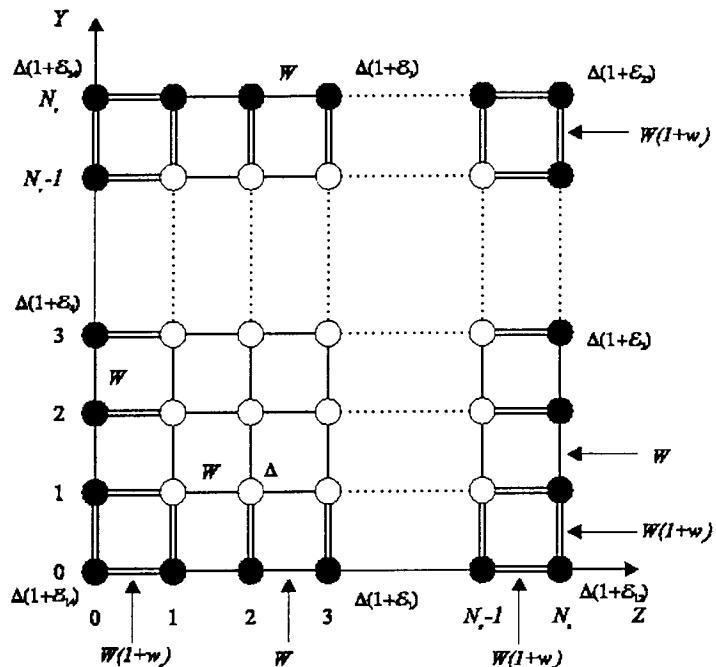
U skladu sa gore pomenutim, dolazimo do zaključka da elektronski spektar u tankom filmu poseduje dva energetska gepa, donji g i gornji h :

$$g \equiv \mathcal{E}_f^{min} - \mathcal{E}_b^{min} = \left(\frac{\pi}{N_z + 2} \right)^2 \equiv \mathcal{E}_b^{max} - \mathcal{E}_f^{max} = h \quad (2.50)$$

(indeks f označava film, a b beskonačnu strukturu). Vidi se da veličine gepova naglo opadaju sa debljinom filma (kvadratna zavisnost)[9,10]. To znači da je njihova praktična egzistencija vezana samo za ultratanke (nano) strukture.

3 Elektroni u kvantnim žicama

U radu je posmatrana kvantna žica proste kubne kristalne strukture. Dimenzije žice su takve da je ona u x pravcu beskonačna, a u y i z pravcima ima konačnu debljinu (L_1 i L_2). Znači da ovaj sistem poseduje dve granične površine paralelne XZ ravnima i to za: $y = 0$ i $y = L_1$ i dve granične površine paralelne XY ravnima za: $z = 0$ i $z = L_2$. Pošto su granične površine kvantne žice uzete normalno na y i z - pravce, indeksi slojeva n_y i n_z u (2.32) - uzimaju vrednosti $n_y = 0, 1, 2, \dots, N_y$; $n_z = 0, 1, 2, \dots, N_z$ gde je $N_{y/z} \in [2, 20]$. Indeks n_x , koji određuje položaj atoma u svakom sloju može imati proizvoljne celobrojne vrednosti (praktično, od $-\infty$, do $+\infty$) [11,12]. Zbog postojanja granica žice, uzećemo da je energija elektrona oblika:



Slika 3.1: Presek kvantne žice

$$\begin{aligned}
 \Delta_{n_x 00} &= (1 + \varepsilon_{14})\Delta, \\
 \Delta_{n_x n_y 0} &= (1 + \varepsilon_1)\Delta \text{ za } 1 \leq n_y \leq N_y - 1, \\
 \Delta_{n_x N_y 0} &= (1 + \varepsilon_{12})\Delta, \\
 \Delta_{n_x N_y n_z} &= (1 + \varepsilon_2)\Delta \text{ za } 1 \leq n_z \leq N_z - 1, \\
 \Delta_{n_x N_y N_z} &= (1 + \varepsilon_{23})\Delta, \\
 \Delta_{n_x n_y N_z} &= (1 + \varepsilon_3)\Delta \text{ za } 1 \leq n_y \leq N_y - 1, \\
 \Delta_{n_x 0 N_z} &= (1 + \varepsilon_{34})\Delta, \\
 \Delta_{n_x 0 n_z} &= (1 + \varepsilon_4)\Delta \text{ za } 1 \leq n_z \leq N_z - 1,
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

a matrični elementi elektronskog preskoka sa sloja na sloj su:

$$W_{\vec{n}; n_x n_y + 1 n_z} = \begin{cases} (1 + w_4)W & n_y = 0 \quad 0 \leq n_z \leq N_z \\ W & 1 \leq n_y \leq N_y - 2 \quad 0 \leq n_z \leq N_z \\ (1 + w_2)W & n_y = N_y - 1 \quad 0 \leq n_z \leq N_z \\ 0 & n_y = N_y \quad 0 \leq n_z \leq N_z \end{cases} \tag{3.2}$$

$$W_{\vec{n};n_x n_y - 1 n_z} = \begin{cases} (1+w_2)W & n_y = N_y \quad 0 \leq n_z \leq N_z \\ W & 2 \leq n_y \leq N_y - 1 \quad 0 \leq n_z \leq N_z \\ (1+w_4)W & n_y = 1 \quad 0 \leq n_z \leq N_z \\ 0 & n_y = 0 \quad 0 \leq n_z \leq N_z \end{cases} \quad (3.3)$$

$$W_{\vec{n};n_x n_y n_z + 1} = \begin{cases} (1+w_1)W & n_z = 0 \quad 0 \leq n_y \leq N_y \\ W & 1 \leq n_z \leq N_z - 2 \quad 0 \leq n_y \leq N_y \\ (1+w_3)W & n_z = N_z - 1 \quad 0 \leq n_y \leq N_y \\ 0 & n_z = N_z \quad 0 \leq n_y \leq N_y \end{cases} \quad (3.4)$$

$$W_{\vec{n};n_x n_y n_z - 1} = \begin{cases} (1+w_3)W & n_z = N_z \quad 0 \leq n_y \leq N_y \\ W & 2 \leq n_z \leq N_z - 1 \quad 0 \leq n_y \leq N_y \\ (1+w_1)W & n_z = 1 \quad 0 \leq n_y \leq N_y \\ 0 & n_z = 0 \quad 0 \leq n_y \leq N_y \end{cases} \quad (3.5)$$

pri čemu je za svaki sloj,

$$W_{n_x n_y n_z; n_x \pm 1, n_y n_z} \equiv W, \quad (3.6)$$

gde je W - konstanta elektronskog transfera idealnog kristala.

3.1 Modelni hamiltonijan

Elektronski hamiltonijan kvantnih žica slično kao i kod filma možemo napisati u obliku zbiru dva hamiltonijana, tako da je zapreminski hamiltonijan oblika:

$$H_z = \sum_{m_x}^N \sum_{m_y=2}^{N_y-2} \sum_{m_z=2}^{N_z-2} a_{m_x m_y m_z}^+ [\Delta a_{m_x m_y m_z} - W (a_{m_x+1, m_y m_z} + a_{m_x-1, m_y m_z} + a_{m_x m_y + 1, m_z} + a_{m_x m_y - 1, m_z} + a_{m_x m_y m_z + 1} + a_{m_x m_y m_z - 1})], \quad (3.7)$$

a površinski:

$$\begin{aligned} H_p = & \sum_{m_x}^N \left\{ \sum_{m_y=2}^{N_y-2} \left\{ a_{m_x m_y 0}^+ [(1+\varepsilon_1)\Delta a_{m_x m_y 0} - (1+w_1)W a_{m_x m_y 1}] - \right. \right. \\ & - W(a_{m_x+1, m_y 0} + a_{m_x-1, m_y 0} + a_{m_x m_y + 1, 0} + a_{m_x m_y - 1, 0})] + \\ & + a_{m_x m_y N_z}^+ [(1+\varepsilon_3)\Delta a_{m_x m_y N_z} - (1+w_3)W a_{m_x m_y N_z - 1}] - \\ & - W(a_{m_x+1, m_y N_z} + a_{m_x-1, m_y N_z} + a_{m_x m_y + 1, N_z} + a_{m_x m_y - 1, N_z})] - \\ & + a_{m_x m_y 1}^+ [\Delta a_{m_x m_y 1} - (1+w_1)W a_{m_x m_y 0} - W a_{m_x m_y 2}] - \\ & - W(a_{m_x+1, m_y 1} + a_{m_x-1, m_y 1} + a_{m_x m_y + 1, 1} + a_{m_x m_y - 1, 1})] \} - \\ & + \sum_{m_z=2}^{N_z-2} \left\{ a_{m_x 0 m_z}^+ [(1+\varepsilon_4)\Delta a_{m_x 0 m_z} - (1+w_4)W a_{m_x 1 m_z}] - \right. \\ & - W(a_{m_x+1, 0 m_z} + a_{m_x-1, 0 m_z} + a_{m_x 0 m_z + 1} + a_{m_x 0 m_z - 1})] + \\ & + a_{m_x N_y - 1 m_z}^+ [\Delta a_{m_x N_y - 1 m_z} - (1+w_2)W a_{m_x N_y m_z} - W a_{m_x N_y - 2 m_z}] - \\ & - W(a_{m_x+1, N_y - 1 m_z} + a_{m_x-1, N_y - 1 m_z} + a_{m_x N_y - 1 m_z + 1} + a_{m_x N_y - 1 m_z - 1})] + \\ & + a_{m_x N_y m_z}^+ [(1+\varepsilon_2)\Delta a_{m_x N_y m_z} - (1+w_2)W a_{m_x N_y - 1 m_z}] - \\ & - W(a_{m_x+1, N_y m_z} + a_{m_x-1, N_y m_z} + a_{m_x N_y m_z + 1} + a_{m_x N_y m_z - 1})] \} + \\ & + a_{m_x 10}^+ [(1+\varepsilon_1)\Delta a_{m_x 10} - W(a_{m_x+1, 10} + a_{m_x-1, 10})] - \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - (1 + w_4)W a_{m_x 00} - (1 + w_1)W a_{m_x 11} - W a_{m_x 20}] + \\
& + a_{m_x N_y - 1, 0}^+ [(1 + \varepsilon_1) \Delta a_{m_x N_y - 1, 0} - (1 + w_2)W a_{m_x N_y 0} - \\
& - W(a_{m_x + 1, N_y - 1, 0} + a_{m_x - 1, N_y - 1, 0} + a_{m_x N_y - 2, 0})] + \\
& + a_{m_x N_y 1}^+ [(1 + \varepsilon_2) \Delta a_{m_x N_y 1} - W(a_{m_x + 1, N_y 1} + a_{m_x - 1, N_y 1}) - \\
& - (1 + w_2)W a_{m_x N_y - 1, 1} - (1 + w_1)W a_{m_x N_y 0} - W a_{m_x N_y 2}] + \\
& + a_{m_x N_y N_z - 1}^+ [(1 + \varepsilon_2) \Delta a_{m_x N_y N_z - 1} - W(a_{m_x + 1, N_y N_z - 1} + a_{m_x - 1, N_y N_z - 1}) - \\
& - (1 + w_2)W a_{m_x N_y - 1 N_z - 1} - (1 + w_3)W a_{m_x N_y N_z} - W a_{m_x N_y N_z - 2}] + \\
& + a_{m_x N_y - 1 N_z}^+ [(1 + \varepsilon_3) \Delta a_{m_x N_y - 1 N_z} - W(a_{m_x + 1, N_y - 1 N_z} + a_{m_x - 1, N_y - 1 N_z}) - \\
& - (1 + w_2)W a_{m_x N_y N_z} - (1 + w_3)W a_{m_x N_y - 1 N_z - 1} - W a_{m_x N_y - 2 N_z}] + \\
& + a_{m_x 1 N_z}^+ [(1 + \varepsilon_3) \Delta a_{m_x 1 N_z} - W(a_{m_x + 1, 1 N_z} + a_{m_x - 1, 1 N_z}) - \\
& - (1 + w_4)W a_{m_x 0 N_z} - (1 + w_3)W a_{m_x 1 N_z - 1} - W a_{m_x 2 N_z}] + \\
& + a_{m_x 0 N_z - 1}^+ [(1 + \varepsilon_4) \Delta a_{m_x 0 N_z - 1} - W(a_{m_x + 1, 0 N_z - 1} + a_{m_x - 1, 0 N_z - 1}) - \\
& - (1 + w_4)W a_{m_x 1 N_z - 1} - (1 + w_3)W a_{m_x 0 N_z} - W a_{m_x 0 N_z - 2}] + \\
& + a_{m_x 1 N_z - 1}^+ [\Delta a_{m_x 1 N_z - 1} - W(a_{m_x + 1, 1 N_z - 1} + a_{m_x - 1, 1 N_z - 1}) - \\
& - (1 + w_4)W a_{m_x 0 N_z - 1} - (1 + w_3)W a_{m_x N_y - 1 N_z} - W a_{m_x N_y - 1 N_z - 2} - W a_{m_x 2 N_z - 1}] + \\
& + a_{m_x 11}^+ [\Delta a_{m_x 11} - W(a_{m_x + 1, 11} + a_{m_x - 1, 11}) - \\
& - (1 + w_4)W a_{m_x 01} - (1 + w_1)W a_{m_x 10} - W a_{m_x 21} - W a_{m_x 12}] + \\
& + a_{m_x N_y - 1, 1}^+ [\Delta a_{m_x N_y - 1, 1} - W(a_{m_x + 1, N_y - 1, 1} + a_{m_x - 1, N_y - 1, 1}) - \\
& - (1 + w_2)W a_{m_x N_y 1} - (1 + w_1)W a_{m_x N_y - 1, 0} - W a_{m_x N_y - 2, 1} - W a_{m_x N_y - 1, 2}] + \\
& + a_{m_x N_y - 1 N_z - 1}^+ [\Delta a_{m_x N_y - 1 N_z - 1} - W(a_{m_x + 1, N_y - 1 N_z - 1} + a_{m_x - 1, N_y - 1 N_z - 1}) - \\
& - (1 + w_2)W a_{m_x N_y N_z - 1} - (1 + w_3)W a_{m_x N_y - 1 N_z} - \\
& - W(a_{m_x N_y - 2 N_z - 1} - a_{m_x N_y - 1 N_z - 2})] + \\
& + a_{m_x m_y N_z - 1}^+ [\Delta a_{m_x m_y N_z - 1} - (1 + w_3)W a_{m_x m_y N_z} - W a_{m_x m_y N_z - 2} - \\
& - W(a_{m_x + 1 m_y N_z - 1} + a_{m_x - 1 m_y N_z - 1} + a_{m_x m_y + 1 N_z - 1} + a_{m_x m_y - 1 N_z - 1})] + \\
& + a_{m_x 0 m_z}^+ [\Delta a_{m_x 0 m_z} - (1 + w_4)W a_{m_x 0 m_z} - W a_{m_x 1 m_z} - \\
& - W(a_{m_x + 1 0 m_z} + a_{m_x - 1 0 m_z} + a_{m_x 0 m_z + 1} + a_{m_x 0 m_z - 1})]
\end{aligned} \tag{3.8}$$

3.2 Jednačina kretanja

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

$$G_{\vec{n}, \vec{m}}(t) = \Theta(t) \langle \{a_{\vec{n}}(t), a_{\vec{m}}^+(0)\} \rangle, \tag{3.9}$$

koja zadovoljava jednačinu kretanja:

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

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

$$\{a_{\vec{n}}, a_{\vec{m}}^+\} = \delta_{\vec{n}, \vec{m}}, \quad \{a_{\vec{n}}, a_{\vec{m}}\} = \{a_{\vec{n}}^+, a_{\vec{m}}^+\} = 0, \tag{3.11}$$

Zamenom dobijenih komutatora u jednačinu kretanja i uvodjenjem vremenske ($t \rightarrow \omega$) i delimične prostorne ($\{n_x n_y n_z\} \rightarrow \{k_x n_y n_z\}$) Furije-transformacije:

$$G_{n_x n_y n_z; \vec{m}}(t) = \frac{1}{N_x} \sum_{k_x} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{ik_x a_x (n_x - m_x)} e^{-i\omega t} G_{n_y n_z; m_y m_z}(k_x; \omega) \quad (3.12)$$

$$\delta_{n_x m_x} \delta_{n_y m_y} \delta_{n_z m_z} = \frac{1}{N_x} \sum_{k_x} e^{ik_x a_x (n_x - m_x)} \delta_{n_y m_y} \delta_{n_z m_z},$$

(gde je: $n_{y/z} = 0, 1, 2, \dots N_{y/z}$ i $a_x = a$) dobija se sistem diferencnih jednačina:

$$1. \ n_z = 0$$

$$(a) \ n_y = 0$$

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - (1 + \varepsilon_{14})\Delta + 2W \cos ak_x] G_{0,0} + (1 + w_4)WG_{1,0} + \\ & + (1 + w_1)WG_{0,1} = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{0,m_y} \delta_{0,m_z} \end{aligned} \quad (3.13)$$

$$(b) \ n_y = 1$$

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - (1 + \varepsilon_1)\Delta + 2W \cos ak_x] G_{1,0} + WG_{2,0} + \\ & + (1 + w_4)W(G_{0,0} + G_{1,1}) = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{1,m_y} \delta_{0,m_z} \end{aligned} \quad (3.14)$$

$$(c) \ 2 \leq n_y \leq N_y - 2$$

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - (1 + \varepsilon_1)\Delta + 2W \cos ak_x] G_{n_y,0} + W(G_{n_y+1,0} + G_{n_y-1,0}) + \\ & + (1 + w_1)WG_{n_y,1} = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{n_y, m_y} \delta_{0,m_z} \end{aligned} \quad (3.15)$$

$$(d) \ n_y = N_y - 1$$

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - (1 + \varepsilon_1)\Delta + 2W \cos ak_x] G_{N_y-1,0} + (1 + w_2)WG_{N_y,0} + \\ & + WG_{N_y-2,0} + (1 + w_1)WG_{N_y-1,1} = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{N_y-1, m_y} \delta_{0,m_z} \end{aligned} \quad (3.16)$$

$$(e) \ n_y = N_y$$

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - (1 + \varepsilon_{12})\Delta + 2W \cos ak_x] G_{N_y,0} + (1 + w_2)WG_{N_y-1,0} + \\ & + (1 + w_1)WG_{N_y,1} = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{N_y, m_y} \delta_{0,m_z} \end{aligned} \quad (3.17)$$

$$2. \ n_z = 1$$

$$(a) \ n_y = 1$$

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega + 2W \cos ak_x] G_{1,1} + WG_{2,1} + (1 + w_4)WG_{0,1} + WG_{1,2} + \\ & + (1 + w_1)WG_{1,0} = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{1,m_y} \delta_{1,m_z} \end{aligned} \quad (3.18)$$

(b) $2 \leq n_y \leq N_y - 2$

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega + 2W \cos ak_x] G_{n_y,1} + W(G_{n_y+1,1} + G_{n_y-1,1} + G_{n_y,2}) + \\ & + (1+w_1)WG_{n_y,0} = \frac{i\hbar}{2\pi}\delta_{n_y,m_y}\delta_{1,m_z} \end{aligned} \quad (3.19)$$

(c) $n_y = N_y - 1$

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega + 2W \cos ak_x] G_{N_y-1,1} + (1+w_2)WG_{N_y,1} + W(G_{N_y-2,1} + G_{N_y-1,2}) + \\ & + (1+w_1)WG_{N_y-1,0} = \frac{i\hbar}{2\pi}\delta_{N_y-1,m_y}\delta_{1,m_z} \end{aligned} \quad (3.20)$$

3. $2 \leq n_z \leq N_z - 2$

(a) $n_y = 0$

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - (1+\varepsilon_4)\Delta + 2W \cos ak_x] G_{0,n_z} + (1+w_4)WG_{1,n_z} + \\ & + W(G_{0,n_z+1} + G_{0,n_z-1}) = \frac{i\hbar}{2\pi}\delta_{0,m_y}\delta_{n_z,m_z} \end{aligned} \quad (3.21)$$

(b) $n_y = 1$

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega + 2W \cos ak_x] G_{1,n_z} + WG_{2,n_z} + (1+w_4)WG_{0,n_z} + \\ & + W(G_{1,n_z+1} + G_{1,n_z-1}) = \frac{i\hbar}{2\pi}\delta_{1,m_y}\delta_{n_z,m_z} \end{aligned} \quad (3.22)$$

(c) $2 \leq n_y \leq N_y - 2$

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega + 2W \cos ak_x] G_{n_y,n_z} + W(G_{n_y+1,n_z} + WG_{n_y-1,n_z}) + \\ & + W(G_{n_y,n_z+1} + G_{n_y,n_z-1}) = \frac{i\hbar}{2\pi}\delta_{n_y,m_y}\delta_{n_z,m_z} \end{aligned} \quad (3.23)$$

(d) $n_y = N_y - 1$

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega + 2W \cos ak_x] G_{N_y-1,n_z} + W(G_{N_y,n_z} + G_{N_y-2,n_z}) + \\ & + W(G_{N_y-1,n_z+1} + G_{N_y-1,n_z-1}) = \frac{i\hbar}{2\pi}\delta_{N_y-1,m_y}\delta_{n_z,m_z} \end{aligned} \quad (3.24)$$

(e) $n_y = N_y$

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - (1+\varepsilon_2)\Delta + 2W \cos ak_x] G_{N_y,n_z} + (1+w_2)WG_{N_y-1,n_z} + \\ & + W(G_{N_y,n_z+1} + G_{N_y,n_z-1}) = \frac{i\hbar}{2\pi}\delta_{N_y,m_y}\delta_{n_z,m_z} \end{aligned} \quad (3.25)$$

4. $n_z = N_z - 1$

(a) $n_y = 1$

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega + 2W \cos ak_x] G_{1,N_z-1} + WG_{2,N_z-1} + (1+w_4)WG_{0,N_z-1} + \\ & + (1+w_3)WG_{1,N_z} + WG_{1,N_z-2} = \frac{i\hbar}{2\pi}\delta_{1,m_y}\delta_{N_z-1,m_z} \end{aligned} \quad (3.26)$$

(b) $2 \leq n_y \leq N_y - 2$

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega + 2W \cos ak_x] G_{n_y,N_z-1} + W(G_{n_y+1,N_z-1} + G_{n_y-1,N_z-1}) + \\ & + (1+w_3)WG_{n_y,N_z} + WG_{n_y,N_z-2} = \frac{i\hbar}{2\pi}\delta_{n_y,m_y}\delta_{N_z-1,m_z} \end{aligned} \quad (3.27)$$

(c) $n_y = N_y - 1$

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega + 2W \cos ak_x] G_{N_y-1, N_z-1} + (1+w_2)WG_{N_y, N_z-1} + WG_{N_y-2, N_z-1} + \\ & + (1+w_3)WG_{N_y-1, N_z} + WG_{N_y-1, N_z-2} = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{N_y-1, m_y} \delta_{N_z-1, m_z} \end{aligned} \quad (3.28)$$

5. $n_z = N_z$ (a) $n_y = 0$

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - (1+\varepsilon_{34})\Delta + 2W \cos ak_x] G_{0, N_z} + (1+w_4)WG_{1, N_z} + \\ & + (1+w_3)WG_{0, N_z-1} = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{0, m_y} \delta_{N_z, m_z} \end{aligned} \quad (3.29)$$

(b) $n_y = 1$

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - (1+\varepsilon_3)\Delta + 2W \cos ak_x] G_{1, N_z} + WG_{2, N_z} + (1+w_4)WG_{0, N_z} + \\ & + (1+w_3)WG_{1, N_z-1} = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{1, m_y} \delta_{N_z, m_z} \end{aligned} \quad (3.30)$$

(c) $2 \leq n_y \leq N_y - 2$

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - (1+\varepsilon_3)\Delta + 2W \cos ak_x] G_{n_y, N_z} + W(G_{n_y+1, N_z} + G_{n_y-1, N_z}) + \\ & + (1+w_3)WG_{n_y, N_z-1} = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{n_y, m_y} \delta_{N_z, m_z} \end{aligned} \quad (3.31)$$

(d) $n_y = N_y - 1$

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - (1+\varepsilon_3)\Delta + 2W \cos ak_x] G_{N_y-1, N_z} + (1+w_2)WG_{1, N_z} + WG_{N_y-2, N_z} + \\ & + (1+w_3)WG_{N_y-1, N_z+1} + WG_{N_y-1, N_z-1} = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{N_y-1, m_y} \delta_{N_z, m_z} \end{aligned} \quad (3.32)$$

(e) $n_y = N_y$

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - (1+\varepsilon_{23})\Delta + 2W \cos ak_x] G_{N_y, N_z} + (1+w_2)WG_{N_y-1, N_z} + \\ & + (1+w_3)WG_{N_y, N_z-1} = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{N_y, m_y} \delta_{N_z, m_z} \end{aligned} \quad (3.33)$$

Dobijeni sistem diferencnih jednačina u opštem slučaju nema analitičko rešenje. U daljem radu se vrši analiza idealne kvantne žice kod koje su perturbacioni parametri jednaki nuli ($\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon_3 = \varepsilon_4 = \varepsilon_{12} = \varepsilon_{23} = \varepsilon_{34} = \varepsilon_{14} = w_1 = w_2 = w_3 = w_4 = 0$). Sada možemo formirati sistem od jednačina (3.13-33). Svaku od ovih jednačina delimo sa W , pri čemu uvodimo oznake:

$$\varrho = \hbar \frac{\omega}{W} - \frac{\Delta}{W} + 2 \cos ak_x ; \quad (3.34)$$

$$G_{n_y, n_z; m_y, m_z}(k_x; \omega) \equiv G_{n_y, n_z} ; \quad \mathcal{K}_{n_y, n_z} = \frac{i\hbar}{2\pi W} \delta_{n_y, n_z, m_y, m_z}$$

(indeksi m_y i m_z su „parazitski” pa su ovde izbačeni). Pomenuti sistem jednačina onda ima opšti oblik:

$$\begin{aligned} & G_{n_y-1, n_z} + \\ & G_{n_y, n_z-1} + \varrho G_{n_y, n_z} + G_{n_y, n_z+1} + \\ & + G_{n_y+1, n_z} = \mathcal{K}_{n_y, n_z} \end{aligned} \quad (3.35)$$

Ova je zapravo $2D$ sistem diferencnih algebarskih jednačina (posebno po n_y i posebno po n_z) i sadrži $(N_y + 1) \times (N_z + 1)$ nepoznatih Grinovih funkcija.

3.3 Zakon disperzije

Na osnovu opštih algebarskih stavova, jasno je da se nepoznate Grinove funkcije iz (3.35) mogu izraziti kao:

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

gde \mathcal{D}_{n_y, n_z} predstavlja odgovarajuću „zamensku” determinantu, a $\mathcal{D}_{N_y+1, N_z+1}$ - $2D$ determinantu sistema:

$$\mathcal{D}_{N_y+1, N_z+1} = \begin{vmatrix} R & J & O & \cdots & O & O & O \\ J & R & J & \cdots & O & O & O \\ O & J & R & \cdots & O & O & O \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ O & O & O & \cdots & R & J & O \\ O & O & O & \cdots & J & R & J \\ O & O & O & \cdots & O & J & R \end{vmatrix}_{N_y+1} \quad (3.36)$$

gde je:

$$R \equiv R_{N_z+1} = \begin{bmatrix} \varrho & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & \varrho & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \varrho & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \varrho & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & \varrho & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & \varrho \end{bmatrix}_{N_z+1} \quad (3.37)$$

J je jedinična, a O nulta matrica (obe reda $N_z + 1$).

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:

$$\mathcal{D}_{N_y+1, N_z+1} \equiv 0. \quad (3.38)$$

Kako $\mathcal{D}_{N_y+1, N_z+1}(\varrho)$ predstavlja poznatu $2D$ determinantu sistema, ona može da se izrazi preko karakterističnih Čebiševljevih polinoma druge vrste.

Uslov (3.38) se „raspada” na dva uslova:

$$D_{N_y+1} \equiv 0 ; \quad R_{N_z+1} \equiv 0 , \quad (3.39)$$

pri čemu D_{N_y+1} predstavlja „običnu” determinantu $\mathcal{D}_{N_y+1, N_z+1}$ u kojoj je R zamjenjen sa ϱ i J sa 1.

Rešavanjem uslova $D_{N_y+1} = 0$ dobijaju se vrednosti:

$$\varrho_\nu = -2 \cos ak_y(\nu) ; \quad k_y(\nu) = \frac{\pi}{a} \frac{\nu}{N_y + 2} ; \quad \nu = 1, 2, \dots, N_y + 1 , \quad (3.40)$$

a rešavanjem uslova $R_{N_z+1} = 0$ dobijaju se vrednosti:

$$\varrho_\mu = -2 \cos ak_z(\mu) ; \quad k_z(\mu) = \frac{\pi}{a} \frac{\mu}{N_z + 2} ; \quad \mu = 1, 2, \dots, N_z + 1 . \quad (3.41)$$

Poznato je da je:

$$\varrho = \varrho_{\mu,\nu} = \varrho_\mu + \varrho_\nu , \quad (3.42)$$

gde je:

$$\varrho = 4\mathcal{E}_{\vec{k}} - 4 \left(1 + \sin^2 \frac{ak_x}{2} \right) . \quad (3.43)$$

Na osnovu izraza (3.40-3.43) dobija se zakon disperzije elektrona u kvantnim žicama:

$$\mathcal{E}_{\vec{k}} = \sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y(\nu)}{2} + \sin^2 \frac{ak_z(\mu)}{2} , \quad (3.44)$$

koji je grafički predstavljen na slikama 3.2 i 3.3. Vidi se da kvaziimpuls elektrona u kvantnim žicama uzima diskretne vrednosti u y i z -pravcima, dok je u x -pravcu praktično kontinualan.

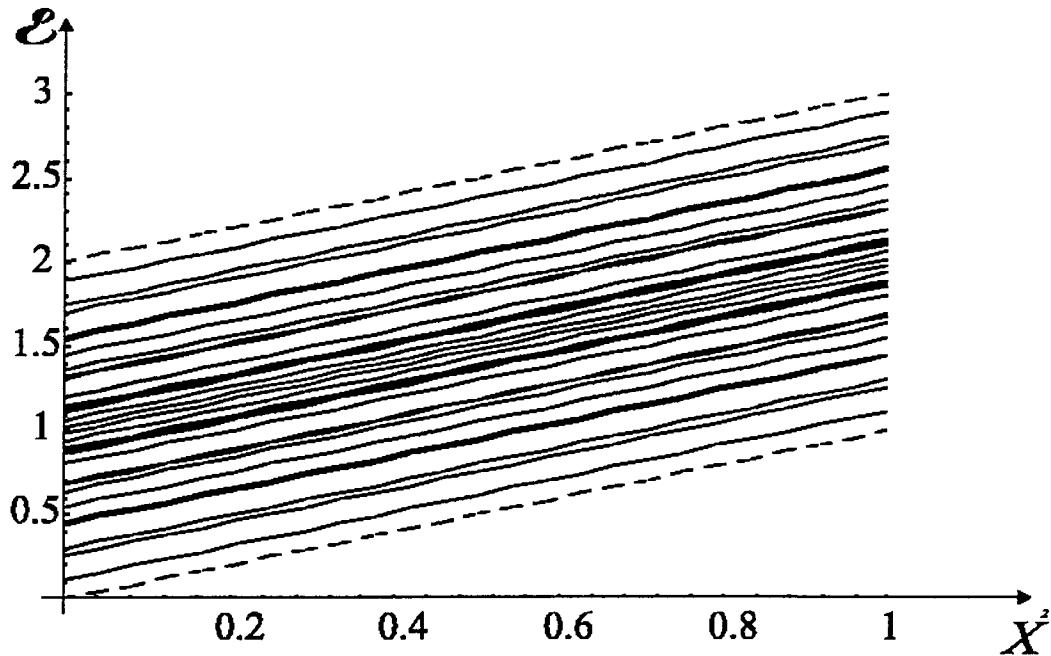
Takođe se uočava da je minimalna energija elektrona različita od nule (kada je $k_x^{min} = 0$) i data je izrazom:

$$\mathcal{E}_{\vec{k}}^{min} = \sin^2 \frac{ak_y^{min}(\nu)}{2} + \sin^2 \frac{ak_z^{min}(\mu)}{2} , \quad (3.45)$$

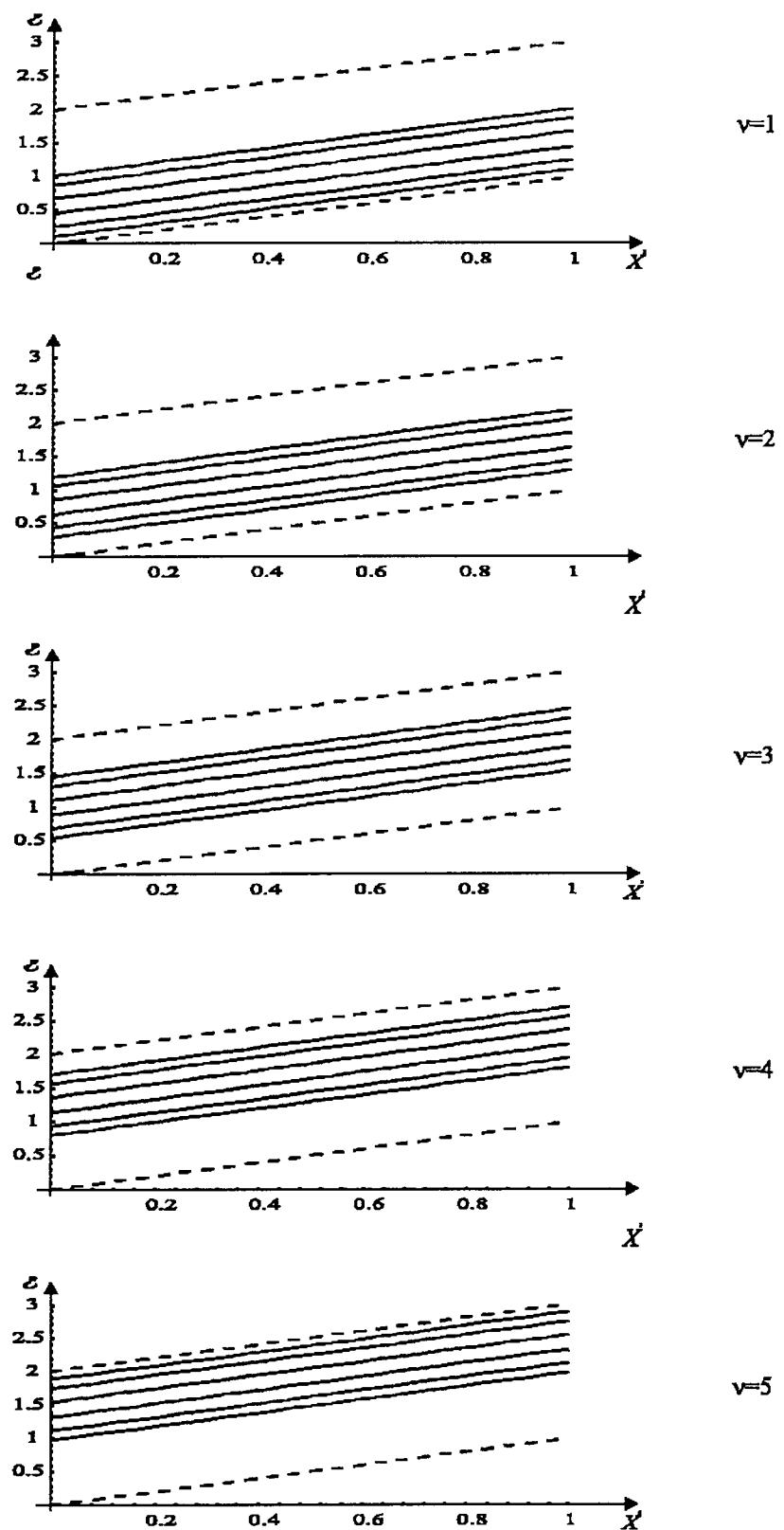
gde su:

$$k_y^{min}(\nu) = k_y(1) = \frac{\pi}{a} \frac{1}{N_y + 2} ; \quad k_z^{min}(\mu) = k_z(1) = \frac{\pi}{a} \frac{1}{N_z + 2} . \quad (3.46)$$

Poredjenjem izraza (2.50) i (3.45) za energetske geopolove u film-strukturama i kvantnim žicama vidi se da oba zavise od dimenzija uzorka, ali da je to kod kvantnih žica izraženije jer poseduju dva ograničenja. Sa povećanjem dimenzija uzorka geopolovi iščezavaju.



Slika 3.2: Kompletan elektronski spektar $\mathcal{E} = \mathcal{E}_{\mu,\nu}$, $X \equiv \sin(ak_x/2)$

Slika 3.3: Parcijalni elektronski spektri $\mathcal{E} = \mathcal{E}_{\mu,\nu}$, $X \equiv \sin(ak_x/2)$

Na ovim slikama dat je grafički prikaz osnovnih karakteristika elektronskog spektra, tj. dozvoljenih energija u kvantnim žicama. Najbitnije razlike jasno se mogu uočiti ako ih uporedimo sa istim u neograničenim i film-strukturama. Za idealne beskonačne strukture kontinualna zona dozvoljenih elektronskih energija, pod uticajem dveju paralelnih graničnih površina kod filma, cepa se na diskretan niz kontinualnih (monoslojnih ili dvodimenzionalnih) podzona. Broj tih podzona jednak je broju atomskih slojeva izmedju dve granične površine filma. Na slici je prikazana kvantna žica sa 5 monoatomskih slojeva duž jednog pravca ograničenja posebno za $\nu = 1, \nu = 2, \nu = 3, \nu = 4, \nu = 5$. Svaka od tih podzona cepa se na diskretan niz kontinualnih (monolančanih ili jednodimenzionalnih) podpodzona čiji je broj jednak broju atomskih slojeva izmedju druge dve granične površine. To je prikazano sa 6 punih linija za $\mu = 1, 2, 3, 4, 5, 6$. Kompletan spektar mogućih (dovoljenih) diskretnih elektronskih energija za slučaj 6×5 kvantnih žica prikazani su na poslednjoj slici. Ovde dolazi do preklapanja nekih podpodzonskih nivoa koji pripadaju različitim energetskim podzonama. Kao posledica postojanja prostornih granica primetni su dodatni energetski gepovi (za film i žicu).

4 Z a k l j u č a k

U radu su istraženi i analizirani energetski spektri (moguća energetska stanja) elektrona u kristalnim ograničenim strukturama (kvantnim žicama), sa primitivnom kubnom rešetkom. Dobijeni rezultati su uporedjeni sa istim u balku i tankom filmu. Na osnovu ovoga se došlo do sledećih važnijih rezultata.

1. Ove analize su pokazale bitne razlike u zakonu disperzije elektrona u pomenutim sistemima, kao isključive posledice postojanja granica odgovarajuće strukture, u kojima energetski spektri poseduju energetske gepove. Veličine gepova zavise od dimenzija uzoraka (debljine filma, odnosno, debljine i širine žice) i veoma brzo - praktično parabolički, opadaju sa njihovim povećanjem.
2. Postojanje graničnih uslova ima za posledicu promenu energetske zone elektrona. U odnosu na zonu dozvoljenih energija idealnih struktura sa praktično kontinualnim rasporedom, zona elektronskih dozvoljenih energija u filmu je izrazito diskretna. Ona se sastoji od dvodimenzionih podzona. U svakoj od podzona energija uzima kontinualne vrednosti. Povećanjem broja slojeva filma povećava se broj diskretnih stanja unutar zone dozvoljenih energija. Kod kvantnih žica ova diskretnost je dvodimensijska - duž oba pravca gde postoje granične površine, što znači da se kontinualnost podzona narušava i one dobijaju diskretan karakter.
3. Spektri elektrona u film-strukturama i kvantnim žicama poseduju donji (kao i jedan gornji) energetski gep. Posledica postojanja donjeg energetskog gepa može da se tumači na sledeći način: on odgovara energiji osnovnog stanja elektronskog sistema i predstavlja najmanju energiju koju treba uložiti da bi u filmu egzistirao elektronski gas. S druge strane, pojavu gornjeg energetskog gepa možemo tumačiti i tako da se u film strukturama, za veličinu minimalnog energetskog gepa, "spušta" Fermijev nivo. Samo elektroni sa energijama većim od ove minimalne, mogu da učestvuju u transportnim i ostalim fizičkim interesantnim procesima, pa se lako može zaključiti da se to lakše ostvaruje u filmovima, a još intenzivnije u žicama.
4. Sve razlike izmedju posmatranih (neograničenih i ograničenih) kristalnih sistema su izraženije, što je film tanji, a žica tanja i uža, i isčezavaju kada debljina filma, odnosno debljina i širina kvantne žice, teže beskonačnosti.

5 Literatura

1. Z.Ikonić i V.Milanović:
POLUPROVODNIČKE KVANTNE MIKROSTRUKTURE,
Univerzitet u Beogradu, Beograd 1997.
2. S.G. Davison, M. Steslicka:
BASIC THEORY OF SURFACE STATES,
Clarendon Press, Oxford 1996.
3. I.Supek: TEORIJSKA FIZIKA I STRUKTURA MATERIJE,
Školska knjiga, Zagreb 1977.
4. B.S.Tošić: STATISTIČKA FIZIKA,
PMF IF, Novi Sad 1978.
5. D.Raković: FIZIČKE OSNOVE I KARAKTERISTIKE
ELEKTROTEHNIČKIH MATERIJALA,
Elektrotehnički fakultet, Beograd 1995.
6. Ž.A.Spašojević i Z.V.Popović: ELEKTROTEHNIČKI
I ELEKTRONSKI MATERIJALI,
Promezzia, Beograd 1995.
7. Ch.Kittel: UVOD U FIZIKU ČVRSTOG STANJA,
Sav.Admin. Beograd 1970.
8. S.M.Stojković: SPEKTRI I STANJA NOSILACA NAELEKTRISANJA
I TRANSPORTNE KARAKTERISTIKE KVAZIDVODIMENZIONIH
SUPERPROVODNIH MATERIJALA,
Mr teza, ETF Beograd 1997.
9. D.Lj.Mirjanić, J.P.Šetrajčić, S.M.Stojković, I.D.Vragović and S.K.Jaćimovski
ELECTRON STATES OF ULTRATHIN CRYSTALS
IEEE - Proc. 21th MIEL 1, 121-124 (1997).
10. D.Lj.Mirjanić, J.P.Šetrajčić, S.M.Stojković, D.Šijačić and I.D.Vragović
ELECTRON SPECTRA IN LOW-DIMENSIONAL CRYSTALLINE SYSTEMS
IEEE - Proc. 22nd MIEL 1, 173-176 (2000).
11. I.Junger, S.M.Stojković, J.P.Šetrajčić, I.D.Vragović i S.B.Lazarev
ELEKTRONSKI SPEKTRI U SIMETRIČNO PERTURBOVANOJ KVANTNOJ ŽICI
Tehnika - Novi materijali - prihvaćeno (1999).
12. S.M.Stojković, J.P.Šetrajčić, D.Šijačić and I.Junger
ELECTRON STATES IN SURFACE PERTURBED QUANTUM WIRES
18th European Conference on Surface Science (ECOSS), Vienna (Austria) 1999.

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: *Svetlana Pelemiš*, br.dos.189/92
AU
- Mentor: *Dr Jovan Šetrajić*,
redovni profesor, PMF, Novi Sad
MN
- Naslov rada: *Elektronski spektri
u kvantnim žicama*
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: (5/27/12/0/2/3/0)
FO
- Naučna oblast: *Fizika*
NO
- Naučna disciplina: *Fizika čvrstog stanja*
ND
- Predmetna odrednica / ključne reči: *kvantne
žice, elektroni, Grinove funkcije, spektri,
ge波ovi*
PO
- Čuva se: *Biblioteka Instituta za fiziku, PMF,
Novi Sad*
- Izvod: *U radu je primenjen metod Grinovih
funkcija za ispitivanje uticaja graničnih uslova
na energetski spektar i moguća stanja elek-
trona (elektronski zakon disperzije) kod kvant-
nih žica sa primitivnom kubnom celijom.*
*Dobijeni rezultati predstavljeni su grafički i
izvršene su analize, odnosno njihova poredje-
nja sa odgovarajućim rezultatima u idealnim
beskonačnim i film-strukturama.*
*Na osnovu toga uočene su najbitnije razlike
izmedju posmatranih sistema.*
IZ
- Datum prihvatanja teme od strane Veća:
19.06.2000.
DP
- Datum odbrane: 07.07.2000.
DO
- Članovi komisije:
Predsednik:
Dr Ljiljana Mašković,
vanr. profesor, PMF, Novi Sad
Članovi:
Dr Jovan Šetrajić,
redovni profesor, PMF, Novi Sad
Dr Radomir Kobilarov,
redovni profesor, PMF, Novi Sad
KO