

UNIVERZITET U NOVOM SADU  
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET  
INSTITUT ZA FIZIKU

УНИВЕРЗИТЕТ У НОВОМ САДУ:  
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ

ПРИМЉЕНО:	- 6 МАРТ 2000
ОРГАНИЗЈЕД:	БРОЈ
0603	9/35

- D I P L O M S K I R A D -

FONONSKI SPEKTRI U KVANTNIM ŽICAMA

MENTOR

PROF. DR JOVAN ŠETRAJČIĆ

KANDIDAT

ZORAN KECOJEVIĆ

Novi Sad, 2000. godine

*MAGCI*

*Pri izradi diplomskog rada, kao i svo vreme tokom studija, krajnje drugarsku pomoć u svako doba pružao mi je mentor ovog rada prof. dr Jovan Šetrajić, na čemu mu se prijateljski zahvaljujem.*

*Zahvalan sam svima koji su na bilo koji način doprineli uspešnom završetku mojih studija.*

**Sadržaj**

<b>1 Uvod</b>	<b>4</b>
<b>2 Fononi u kristalima</b>	<b>5</b>
2.1 Fononi u neograničenim strukturama . . . . .	5
2.2 Formiranje fononskog modela . . . . .	6
2.3 Zakon disperzije fonona . . . . .	7
<b>3 Fononi u kristalnim filmovima</b>	<b>10</b>
3.1 Analiza fononskog modela . . . . .	10
3.2 Spektri i stanja fonona u filmu . . . . .	13
<b>4 Fononi u kvantnim žicama</b>	<b>15</b>
4.1 Formiranje fononskog modela . . . . .	16
4.2 Jednačine kretanja . . . . .	18
4.3 Spektri fonona u žici . . . . .	21
<b>5 Zaključak</b>	<b>25</b>
<b>6 Literatura</b>	<b>26</b>

## 1 Uvod

Za modernu nauku o materijalima [1,2] danas je najznačajnije precizno strukturiranje materijala do dimenzija reda veličine nanometara, posebno na polju elektronike, optoelektronike i visokotemperaturske superprovodnosti. Teorijska i eksperimentalna istraživanja osobina niskodimenzionih sistema (superrešetke, tanki filmovi, kvantne žice i kvantne tačke), postala su u poslednjoj deceniji veoma intenzivna, pa bi se moglo reći da predstavljaju jedan od udarnih pravaca istraživanja u savremenoj fizici kondezovane materije [2-4]. Razlozi interesovanja za ovakve sisteme, kao realnije strukture od neograničenih, su mnogobrojni. Fenomeni povezani sa tako malim dimenzijama dovode do pojave novih i drugačijih, odnosno izmenjenih osobina materijala i specifičnih pojava [1-5] što je interesantno ne samo sa fundamentalnog fizičkog stanovišta, već su takve strukture od šireg praktičnog značaja.

Fononi predstavljaju osnovna pobudjenja u kristalima i fononski podsistem je u njima uvek prisutan, bez obzira na to da li se kao glavni nosioci mehanizama koji „proizvode“ odredjene fizičke osobine, pojave i efekte u kristalnim strukturama javljaju elektroni, eksiton, feroelektronska pobudjenja ili neki drugi vidovi elementarnih ekscitacija. Iz tog razloga, ispitivanje udela i uticaja fononskog podsistema na fizičke karakteristike materijala poseduje veliki značaj za teoriju čvrstog stanja. U ovom radu izvršena je analiza fononskih spektara u kvantnim žicama na bazi metoda dvovremenskih temperaturskih retardovanih Grinovih funkcija. Za rešavanje ovog problema razvijen je i niz drugih matematičkih aparata (metod Hajzenbergovih jednačina kretanja, malih perturbacija, talasnih funkcija itd.), ali je pomenuti formalizam odabran iz sledećih razloga.

1. Iz opšte teorije linearног odziva sistema poznato je da se formiranjem jednačine kretanja za Grinovu funkciju u opštem slučaju dobija nova funkcija Grina, čiji je red viši od reda polazne funkcije. Sukcesivnim ponavljanjem ove procedure dobija se beskonačni lanac medjusobno povezanih jednačina za Grinove funkcije, koji se korišćenjem izvesne dovoljno dobre aproksimacije prekida na taj način što se viša Grinova funkcija izražava pomoću prve niže. Od ovog pravila, medutim, izuzeti su tzv. „kvadratni“ hamiltoniani, čije prisustvo obezbedjuje da se u jednačini kretanja ne pojavljuju Grinove funkcije višeg reda. Kao što će u daljem tekstu biti pokazano, hamiltonian fononskog podsistema superrešetke upravo je takvog oblika.
2. Realni deo pola Grinove funkcije određuje frekvenciju (a samim tim i energiju) elementarnih ekscitacija koje se javljaju u sistemu, dok je recipročna vrednost njegovog imaginarnog dela proporcionalna vremenu života ovih ekscitacija (tj. kvazičestica).

Da bi se izučile posebnosti karakteristika fonona u kvantnim žicama, moraju se prethodno spomenuti te iste karakteristike u neograničenim kristalnim strukturama i tankim filmovima (što je učinjeno u glavama 2 i 3 ovog rada) i na osnovu toga izvršiti poređenje ovih struktura.

## 2 Fononi u kristalima

Najjednostavniji oblik kretanja u čvrstom telu jeste oscilatorno kretanje konstituenata od kojih je sastavljena kristalna rešetka (atoma, molekula, odnosno jona) oko odgovarajućih položaja ravnoteže. Ukoliko se posmatrana kristalna struktura može smatrati neograničenom, onda je ovo oscilatorno kretanje atoma analogno prostiranju talasnih poremećaja (tj. elastičnih talasa) kroz kristal. Ova činjenica implicira mogućnost uspostavljanja izvesne formalne analogije izmedju mehaničkih oscilacija sredine i prostiranja elektromagnetskih talasa: naime, slično kao što elektromagnetsko polje vrši razmenu energije sa drugim sistemima u nedeljivim elementarnim iznosima  $\hbar\omega$  (tj. fotonima), energija vibracije kristalne rešetke takođe je kvantovana, pri čemu se kvant energije elastičnog talasa naziva **fononom**. S obzirom da nikakav eksperiment direktno analagan fotoelektričnom efektu - koji predstavlja jak dokaz u prilog kvantovanja svetlosti - nije do danas izведен sa fononima, postavlja se pitanje eksperimentalne potvrde njihovog postojanja. Najvažniji dokazi uključuju sledeće.

1. Udeo rešetke u topotnom kapacitetu čvrstog tela uvek teži nultoj vrednosti kada temperatura teži nuli. Ovo može biti objašnjeno jedino kvantovanjem vibracija kristalne rešetke.
2. X-zraci i neutroni se neelastično rasejavaju na kristalima, pri čemu promene njihove energije odnosno impulsa odgovaraju kreaciji ili anihilaciji jednog ili više fonona.

Dakle, fononi opisuju oscilatorno kretanje u posmatranoj kristalnoj strukturi i - s obzirom da se kristal u smislu njegovih oscilatornih karakteristika može smatrati sistemom povezanih oscilatora - uvođe se prilikom kvantomehaničkih analiza linearog oscilatora, čija je energija data izrazom:

$$E_n = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar\Omega, \quad n \in (0, 1, 2, \dots) \quad (2.1)$$

a priraštaj energije pri prelasku iz stanja  $n$  u stanje  $n+1$  (tj. energija fonona):

$$E_{n+1} - E_n = \hbar\Omega \quad (2.2)$$

Energija fonona zavisi od mase oscilatora  $M$  i konstante koja karakteriše elastičnu silu oscilatora  $C$ :  $\Omega = \sqrt{C/M}$ , a impuls mu je jednak  $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ . S obzirom da svaki atom prilikom oscilovanja trpi uticaje okolnih atoma i istovremeno i sam utiče na njihovo oscilovanje, fononi u kristalnim strukturama ne mogu se smatrati kvantima oscilovanja pojedinačnih atoma, već predstavljaju elementarna pobudjenja čitavog kristala.

### 2.1 Fononi u neograničenim strukturama

Potencijalna energija kristala na apsolutnoj nuli (tzv. zamrznuti kristal) data je izrazom:

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

pri čemu je  $V(\vec{n} - \vec{m})$  potencijal interakcije izmedju dva atoma na mestima  $\vec{n}$  i  $\vec{m}$ . Ako se temperatura povisi, atomi počinju da osciluju tako da trenutni položaj atoma ne karakterišu više vektori  $\vec{n}$  i  $\vec{m}$ , već vremenski zavisni vektori

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

gde je  $\vec{u}(\vec{n}, t) \equiv \vec{u}(\vec{n})$  pomeraj atoma iz ravnotežnog položaja  $\vec{n}$ . Tada se mora izvršiti i prelaz:

$$V(\vec{n} - \vec{m}) \equiv V_0(\vec{n} - \vec{m}) \rightarrow V \{ (\vec{n} - \vec{m}) + [\vec{u}(\vec{n}) - \vec{u}(\vec{m})] \} .$$

S obzirom da su na niskim temperaturama pomeraji  $\vec{u}(\vec{n})$  mali, koristeći standardnu teoriju malih oscilacija, funkcija  $V$  se razvija u stepeni red po Dekartovim komponentama  $u_\alpha(\vec{n})$  vektora  $\vec{u}(\vec{n})$  oko položaja ravnoteže:

$$\begin{aligned} V\{(\vec{n} - \vec{m}) + [(\vec{u}(\vec{n}) - \vec{u}(\vec{m})]\} &= V_0(\vec{n} - \vec{m}) + \sum_{\alpha; \vec{n}, \vec{m}} \left[ \frac{\partial V(\vec{n} - \vec{m})}{\partial(\vec{n} - \vec{m})_\alpha} \right]_0 [u_\alpha(\vec{n}) - u_\alpha(\vec{m})] + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta; \vec{n}, \vec{m}} \left[ \frac{\partial^2 V(\vec{n} - \vec{m})}{\partial(\vec{n} - \vec{m})_\alpha \partial(\vec{n} - \vec{m})_\beta} \right]_0 [u_\alpha(\vec{n}) - u_\alpha(\vec{m})] [u_\beta(\vec{n}) - u_\beta(\vec{m})] + \dots \end{aligned} \quad (2.4)$$

( $\alpha$  i  $\beta$  označavaju moguće projekcije vektora na ose Dekartovog sistema). Svaki atom leži u nekoj potencijalnoj jami, pa iz uslova stabilnosti kristala sledi da je drugi sabirak s desne strane znaka jednakosti u izrazu (2.4) jednak nuli. Dakle, oscilovanje karakteriše samo treći sabirak u izrazu (2.4) - harmonijski član. Ako se ovaj član sumira po svim čvorovima i doda mu se kinetička energija  $\sum_{\alpha; \vec{n}} M \dot{u}_\alpha^2 / 2$ , dobija se oscilatorični hamiltonijan sistema:

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

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

Pošto sile koje deluju izmedju atoma u kristalu brzo opadaju sa porastom rastojanja  $|\vec{n} - \vec{m}|$  izmedju atoma<sup>1</sup>, to se izraz za potencijalnu energiju može napisati na sledeći način:

$$V(\vec{n} - \vec{m}) \sim \frac{1}{|\vec{n} - \vec{m}|^\gamma}, \quad \gamma > 1.$$

Tada se izraz za potencijalnu energiju u (2.5) može napisati u aproksimaciji najbližih suseda, koja se sastoji u zameni sumiranja  $\vec{n}, \vec{m} \rightarrow \vec{n}, \vec{n} \pm \vec{\lambda}$ , gde  $\vec{\lambda}$  povezuje atom na mestu  $\vec{n}$  sa njegovim najbližim susedima. Kako je intenzitet  $\vec{\lambda}$  za sve najbliže susede isti (idealan kristal!), koeficijent  $C_{\alpha\beta}(\vec{\lambda})$  ne zavisi od  $\vec{\lambda}$ . Na taj način oscilatorični hamiltonijan sistema postaje:

$$H = \sum_{\alpha; \vec{n}} \frac{M}{2} \dot{u}_\alpha^2(\vec{n}) + \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta; \vec{n}, \vec{\lambda}} C_{\alpha\beta} [u_\alpha(\vec{n}) - u_\alpha(\vec{n} \pm \vec{\lambda})] [u_\beta(\vec{n}) - u_\beta(\vec{n} \pm \vec{\lambda})]. \quad (2.6)$$

## 2.2 Formiranje fononskog modela

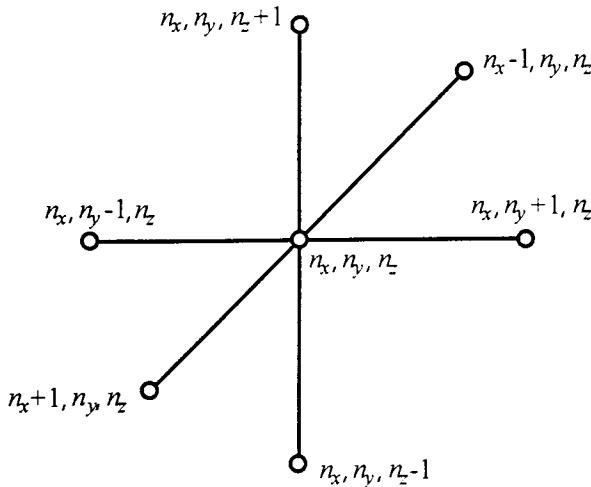
Mada u prirodi nema čistih izotropnih kristala, niti se oni mogu na današnjem nivou tehnologije proizvesti, izučavanje idealnih (beskonačnih) struktura korisno je zbog toga, što se za osnovne fizičke fenomene mogu izračunati njihove globalne karakteristike i dobiti ono što se naziva - kvalitativna slika, a zaključci dobijeni na taj način, kao i metodologija istraživanja, mogu se prenositi na neidealne strukture, a pre svega na kristalne strukture sa narušenom translacionom simetrijom. Idealne beskonačne strukture su kristali sa osobinom translacione invarijantnosti u tri uzajamno nekomplanarna pravca. Ovi pravci, koji se uvode u kristalografsku, ne moraju biti uzajamno ortogonalni, pa se zato u teorijskoj fizici kondenzovane materije uvodi dodatni Dekartov sistem. Ovde će biti posmatran samo kubni kristal kada su kristalografski uvedeni pravci uzajamno ortogonalni

<sup>1</sup>Lenard-Džonsov potencijal koji je proporcionalan  $A r^{-6} - B r^{-12}$ , najpogodniji je kod fonona u slučaju kovalentnih i molekulskih kristala

i ovih problema nema. S obzirom na to, hamiltonijan sistema u aproksimaciji najbližih suseda (2.6) može da se napiše u obliku:

$$H = \sum_{\alpha; \vec{n}} \frac{p_{\alpha; \vec{n}}^2}{2M} + \frac{1}{4} \sum_{\alpha; \vec{n}, \vec{\lambda}} C_{\vec{n}, \vec{\lambda}}^{\alpha\alpha} (u_{\alpha; \vec{n}} - u_{\alpha; \vec{n} \pm \vec{\lambda}})^2, \quad (2.7)$$

gde je  $\vec{p} = M \vec{u}$  - impuls atoma kristala, a  $M$  - masa tih atoma. Drugi sabirak sa desne strane znaka jednakosti predstavlja efektivni medjuatomski potencijal interakcije ( $V_{eff}$ ).



Slika 2.1: Atom u okruženju najbližih suseda

Da bi se shvatio početak primene matematičkog formalizma, priložena je slika 2.1, koja analitički prikazuje  $\vec{n}$ -ti atom kristala u okruženju svojih najbližih suseda. Radi jednostavnosti, pretpostavlja se da se radi o prostoj kubnoj strukturi sa jednim atomom po elementarnoj celiji (primitivna celija). Vidi se da  $|\vec{\lambda}|/a$  može jedino da uzme vrednosti: -1 i 1. U skladu sa svim ovim, izraz za fononski hamiltonijan (2.7) može da se napiše u pogodnijoj (razvijenoj) formi:

$$H = T + V_{eff} \quad (2.8)$$

pri čemu su:

$$T = \sum_{\alpha; \vec{n}} \frac{p_{\alpha; \vec{n}}^2}{2M} \quad (2.9)$$

$$\begin{aligned} V_{eff} &= \sum_{\alpha; n_x, n_y, n_z} \frac{C_\alpha}{4} \left[ (u_{\alpha; n_x+1, n_y, n_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z})^2 + (u_{\alpha; n_x-1, n_y, n_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z})^2 + \right. \\ &+ (u_{\alpha; n_x, n_y+1, n_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z})^2 + (u_{\alpha; n_x, n_y-1, n_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z})^2 + \\ &\left. + (u_{\alpha; n_x, n_y, n_z+1} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z})^2 + (u_{\alpha; n_x, n_y, n_z-1} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z})^2 \right]. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Torzione Hukove konstante  $C_{\alpha\beta}$  su zanemarene u odnosu na konstante istezanja  $C_\alpha \equiv C_{\alpha\alpha}$ , a operatori  $u_{\alpha\vec{n}}$  i  $p_{\alpha\vec{n}} = M \dot{u}_{\alpha\vec{n}}$  zadovoljavaju standardne komutacione relacije:

$$[u_{\alpha\vec{n}}, p_{\beta, \vec{m}}] = i\hbar \delta_{\alpha, \beta} \delta_{\vec{n}, \vec{m}}; \quad [u_{\alpha\vec{n}}, u_{\beta, \vec{m}}] = [p_{\alpha\vec{n}}, p_{\beta, \vec{m}}] = 0. \quad (2.11)$$

### 2.3 Zakon disperzije fonona

Energetski spektri i stanja, kao što je u uvodnom delu naglašeno, biće potraženi metodom Grinovih funkcija. U tu svrhu posmatra se dvovremenska temperaturska Grinova funkcija:

$$G_{\vec{n}, \vec{m}}^\alpha(t - t') \equiv \langle \langle u_{\alpha; \vec{n}}(t) | u_{\alpha; \vec{m}}(t') \rangle \rangle = \Theta(t - t') \langle [u_{\alpha; \vec{n}}(t), u_{\alpha; \vec{m}}(t')] \rangle_0. \quad (2.12)$$

Dvostrukim diferenciranjem ovog izraza po vremenu i neznatnim sredjivanjem, dobija se:

$$M \frac{d^2}{dt^2} G_{\vec{n}, \vec{m}}^\alpha(t - t') = -i\hbar \delta_{\vec{n}, \vec{m}} \delta(t - t') + \frac{\Theta(t - t')}{i\hbar} \langle [[p_{\alpha; \vec{n}}(t), H(t)], u_{\alpha; \vec{m}}(t')] \rangle_0.$$

Uzimanjem  $t' = 0$  i Furije transformacijom  $t \rightarrow \omega$  poslednji izraz prelazi u jednakost:

$$\int d\omega e^{-i\omega t} \left\{ \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{\vec{n},\vec{m}} - M\omega^2 G_{\vec{n},\vec{m}}^\alpha(\omega) - \frac{1}{i\hbar} \langle\langle [p_{\alpha;\vec{n}}, H] \mid u_{\alpha;\vec{m}} \rangle\rangle_\omega \right\} = 0 ,$$

koja je zadovoljena za:

$$- M\omega^2 G_{\vec{n},\vec{m}}^\alpha(\omega) = - \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{\vec{n},\vec{m}} + \frac{1}{i\hbar} \langle\langle [p_{\alpha;\vec{n}}, H] \mid u_{\alpha;\vec{m}} \rangle\rangle_\omega . \quad (2.13)$$

Dalji postupak određivanja Grinovih funkcija  $G_{\vec{n},\vec{m}}^\alpha(\omega)$ , zahteva izračunavanje komutatora koji figurišu u višim Grinovim funkcijama  $\langle\langle \cdots \mid \cdots \rangle\rangle$  iz gornje jednačine.

$$\begin{aligned} [p_{\beta;m_x,m_y,m_z}, H] &= [p_{\beta;m_x,m_y,m_z}, T] + [p_{\beta;m_x,m_y,m_z}, V_{eff}] \equiv \\ &\equiv [p_{\beta;m_x,m_y,m_z}, V_{eff}] = \sum_{\alpha;n_x,n_y,n_z} \frac{C_\alpha}{4} \times \\ &\times \left\{ 2 \left[ p_{\beta;m_x,m_y,m_z}, (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x+1,n_y,n_z}) \right] (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x+1,n_y,n_z}) + \right. \\ &+ 2 \left[ p_{\beta;m_x,m_y,m_z}, (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x-1,n_y,n_z}) \right] (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x-1,n_y,n_z}) + \\ &+ 2 \left[ p_{\beta;m_x,m_y,m_z}, (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y+1,n_z}) \right] (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y+1,n_z}) + \\ &+ 2 \left[ p_{\beta;m_x,m_y,m_z}, (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y-1,n_z}) \right] (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y-1,n_z}) + \\ &+ 2 \left[ p_{\beta;m_x,m_y,m_z}, (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,n_z+1}) \right] (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,n_z+1}) + \\ &+ 2 \left[ p_{\beta;m_x,m_y,m_z}, (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,n_z-1}) \right] (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,n_z-1}) \Big\} = \\ &= -i\hbar \sum_{\alpha;n_x,n_y,n_z} \frac{C_\alpha}{2} \delta_{\alpha\beta} [(\delta_{\vec{n},\vec{m}} - \delta_{n_x+1,m_x} \delta_{n_y,m_y} \delta_{n_z,m_z}) (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x+1,n_y,n_z}) + \\ &+ (\delta_{\vec{n},\vec{m}} - \delta_{n_x-1,m_x} \delta_{n_y,m_y} \delta_{n_z,m_z}) (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x-1,n_y,n_z}) + \\ &+ (\delta_{\vec{n},\vec{m}} - \delta_{n_x,m_x} \delta_{n_y+1,m_y} \delta_{n_z,m_z}) (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y+1,n_z}) + \\ &+ (\delta_{\vec{n},\vec{m}} - \delta_{n_x,m_x} \delta_{n_y-1,m_y} \delta_{n_z,m_z}) (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y-1,n_z}) + \\ &+ (\delta_{\vec{n},\vec{m}} - \delta_{n_x,m_x} \delta_{n_y,m_y} \delta_{n_z+1,m_z}) (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,n_z+1}) + \\ &+ (\delta_{\vec{n},\vec{m}} - \delta_{n_x,m_x} \delta_{n_y,m_y} \delta_{n_z-1,m_z}) (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,n_z-1})] = \\ &= -i\hbar C_\beta (6u_{\beta;m_x,m_y,m_z} - u_{\beta;m_x+1,m_y,m_z} - u_{\beta;m_x-1,m_y,m_z} - \\ &- u_{\beta;m_x,m_y+1,m_z} - u_{\beta;m_x,m_y-1,m_z} - u_{\beta;m_x,m_y,m_z+1} - u_{\beta;m_x,m_y,m_z-1}) . \end{aligned}$$

Ovde su iskorišćene komutacione relacije za pomeraje i impulse (2.11), kao i definicija Kronekerovog simbola. Dalje, uzimajući u obzir:

$$G_{\vec{n},\vec{m}}^\alpha \equiv G_{n_x,n_y,n_z;m_x,m_y,m_z}^\alpha = \langle\langle u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} \mid u_{\alpha;m_x,m_y,m_z} \rangle\rangle \quad (2.14)$$

i zamenom nadjenih komutatora u jednačinu (2.13) sledi:

$$\begin{aligned} - M\omega^2 G_{n_x,n_y,n_z;m_x,m_y,m_z}^\alpha &= - \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{n_x,m_x} \delta_{n_y,m_y} \delta_{n_z,m_z} - C_\alpha (6 G_{n_x,n_y,n_z;m_x,m_y,m_z}^\alpha - \\ &- G_{n_x+1,n_y,n_z;m_x,m_y,m_z}^\alpha - G_{n_x-1,n_y,n_z;m_x,m_y,m_z}^\alpha - G_{n_x,n_y+1,n_z;m_x,m_y,m_z}^\alpha - \\ &- G_{n_x,n_y-1,n_z;m_x,m_y,m_z}^\alpha - G_{n_x,n_y,n_z+1;m_x,m_y,m_z}^\alpha - G_{n_x,n_y,n_z-1;m_x,m_y,m_z}^\alpha) . \end{aligned} \quad (2.15)$$

Primenom nove Furije transformacije ( $\vec{n}, \vec{m} \rightarrow \vec{k}$ ):

$$G_{\vec{n}, \vec{m}}^{\alpha}(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} e^{-i(\vec{n}-\vec{m})\vec{k}} G_{\vec{k}}^{\alpha}(\omega); \quad \delta_{\vec{n}, \vec{m}} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} e^{-i(\vec{n}-\vec{m})\vec{k}}$$

na jednačinu (2.15), te nakon neznatnih algebarskih operacija, ona prelazi u:

$$\frac{M}{N} \sum_{\vec{k}} e^{-i(\vec{n}-\vec{m})\vec{k}} \left\{ \frac{i\hbar}{2\pi M} - G_{\vec{k}}^{\alpha}(\omega) \left[ \omega^2 + 2\frac{C_{\alpha}}{M} (3 - \cos a_x k_x - \cos a_y k_y - \cos a_z k_z) \right] \right\} = 0.$$

Ova jednakost je ispunjena za:

$$\left[ \frac{\omega^2}{\Omega_{\alpha}^2} + 2(\cos a_x k_x + \cos a_y k_y + \cos a_z k_z - 3) \right] G_{\vec{k}}^{\alpha}(\omega) = \frac{i\hbar}{2\pi C_{\alpha}}, \quad (2.16)$$

odnosno:

$$G_{\vec{k}}^{\alpha}(\omega) = \frac{i\hbar}{4\pi M \omega_{\alpha}(\vec{k})} \left[ \frac{1}{\omega - \omega_{\alpha}(\vec{k})} - \frac{1}{\omega + \omega_{\alpha}(\vec{k})} \right]. \quad (2.17)$$

Odavde se, očigledno, polovi Grinovih funkcija nalaze kada se imenici izraza u uglastoj zagradi izjednače sa nulom. Rešavanjem tog uslova po  $\omega \equiv \omega_{\alpha}(\vec{k})$  dobija se traženi zakon disperzije fonona:

$$E_{\alpha}(\vec{k}) \equiv \hbar \omega_{\alpha}(\vec{k}) = 2 E_{\alpha} \sqrt{\sin^2 \frac{a_x k_x}{2} + \sin^2 \frac{a_y k_y}{2} + \sin^2 \frac{a_z k_z}{2}}, \quad (2.18)$$

gde je  $E_{\alpha} = \hbar \Omega_{\alpha} = \hbar \sqrt{C_{\alpha}/M}$ . Zbog poredjenja ove relacije sa odgovarajućom za film strukture, zgodno ju je napisati u sledećoj (bezdimenzionoj) formi:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{\alpha}(\vec{k}) &= 2 \sqrt{\mathcal{R}(k_x k_y) + \mathcal{S}(k_z)}; & \mathcal{E}_{\alpha}(\vec{k}) &\equiv \frac{E_{\alpha}(\vec{k})}{E_{\alpha}}; \\ \mathcal{R}(k_x k_y) &= \sin^2 \frac{a_x k_x}{2} + \sin^2 \frac{a_y k_y}{2}; & \mathcal{S}(k_z) &= \sin^2 \frac{a_z k_z}{2}. \end{aligned} \quad (2.19)$$

U aproksimaciji malih talasnih vektora  $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}$  i obeležavanjem:  $a = a_x = a_y = a_z$ , poslednja relacija se svodi na:

$$\mathcal{E}_{\alpha}(\vec{k}) = a k, \quad (2.20)$$

što predstavlja tipičan i poznat [1,6-9] izraz za zakon disperzije akustičkih fonona.

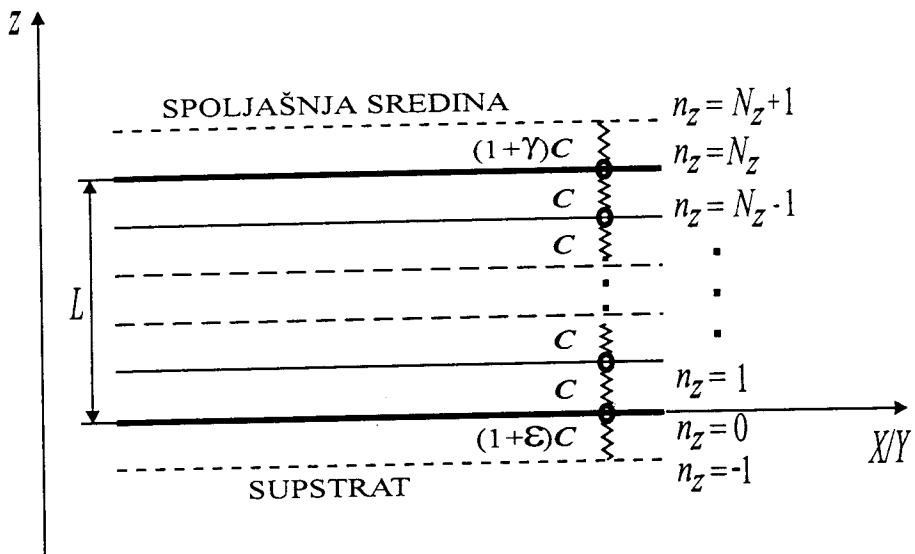
Kvanti mehaničkih pobudjenja sa linearnim zakonom disperzije, tj. osobinom

$$\lim_{k \rightarrow 0} \omega_{\alpha}(\vec{k}) = 0,$$

nazivaju se **akustičkim fononima**. Analizom kristala složene strukture (sa  $\sigma$  podrešetki) dobija se  $3\sigma$  dozvoljenih frekvencija, od kojih tri uvek teže nuli kada  $k \rightarrow 0$  (akustički fononi), dok preostalih  $3\sigma - 3$  frekvencija zadovoljavaju uslov  $\lim_{k \rightarrow 0} \omega_{\alpha}(\vec{k}) \neq 0$ . Mehaničke oscilacije sa ovom osobinom nazivaju se **optičkim fononima**.

### 3 Fononi u kristalnim filmovima

Tanki kristalni filmovi predstavljaju ograničene kristalne strukture kod kojih se uslovi na granicama razlikuju od onih u unutrašnjosti, tj. translaciona simetrija narušena je duž pravca normalnog na film ( $z$ -pravac).



Slika 3.1: Poprečni presek (u  $X/Y - Z$  ravni) modela kristalnog filma

Ako unutar filma (izmedju graničnih površina) nema nikakvih deformacija (narušenja) kristalne strukture (kristalna rešetka je bez primesa, vakancija i sl.), onda se on naziva idealnim filmom [10]. U suprotnom, ako ove deformacije postoje (npr. kao posledice dopingovanja stranim atomima), tada se ta struktura naziva deformisanim filmom.

#### 3.1 Analiza fononskog modela

Posmatra se idealni<sup>2</sup> tanki film kubne kristalne strukture načinjen na supstratu nekim tehničko-tehnološkim postupkom (naparavanjem, spaterovanjem i sl.), čiji su osnovni kristalografski podaci:

$$a_x = a_y = a_z = a ; \quad N_{x,y} \sim 10^8 \gg N_z \sim 10 ;$$

$$C_{\vec{n},\vec{m}}^{\alpha,\beta} = C_{\vec{n},\vec{m}}^{\alpha,\alpha} = C_{\vec{n},\vec{n} \pm \vec{\lambda}}^{\alpha} = C_{\vec{n},\vec{n} \pm \vec{\lambda}} = C_{n_z,n_z \pm 1} ;$$

$$C_{N_z,N_z+1} = C_{N_z+1,N_z} = (1+\gamma)C , \quad C_{-1,0} = C_{0,-1} = (1+\varepsilon)C ; \quad \varepsilon, \gamma \geq -1 ,$$

gde je  $n_z$  - indeks rešetke duž  $z$ -pravca i  $n_z \in (0, 1, 2, \dots, N_z)$ . Na osnovu toga, o modelu se može zaključiti sledeće.

1. Kristalni film poseduje dve beskonačne granične površine paralelne  $XY$  - ravnima i to za  $z = 0$  i  $z = L$ , dok u  $z$  - pravcima ima konačnu debljinu ( $L$ ).
2. Duž  $z$  - ose locirano je  $N_z + 1$  atoma.
3. Torzionate konstante  $C^{\alpha\beta}$  zanemarljive su u odnosu na konstante istezanja  $C_\alpha$ .

<sup>2</sup>Pojam - idealni, koristi se u smislu nenarušenja kristalne strukture (bez prisustva defekata, primesa i sl.), a ne u smislu njene prostorne neograničenosti.

4. Smatra se da atomi, koji pripadaju graničnim slojevima prikazanog tankog filma, interaguju sa spoljašnjom sredinom, bez obzira na to što duž  $z$ -pravaca iznad gornje i ispod donje granične površine nema atoma (motiva, čvorova) filma, ali su granični atomi „spregnuti“ izmenjenim Hukovim silama za atome sredine, odnosno supstrata [1-4,10]. U skladu sa napred navedenim uslovima, konstante elastičnosti koje opisuju interakciju atoma graničnih površina sa spoljašnjim sredinama (supstrat i npr. vazduh), modifikovane su odgovarajućim koeficijentima  $\varepsilon$  i  $\gamma$ .

Uzimajući u obzir uslove  $C_j = C$ , ( $j = 1, 2, \dots, N_z - 1, N_z$ ) i činjenicu da su slojevi za  $n_z \leq -1$  i za  $n_z \geq N_z + 1$  odsutni, moramo obračunati i sledeće:

$$u_{\alpha;n_x,n_y,j} = 0 ; \quad -1 \geq j \wedge j \geq N_z + 1 ; \quad (j \notin [0, N_z]) ,$$

$$C_{-1} = (1 + \varepsilon) C ; \quad C_{N_z+1} = (1 + \gamma) C .$$

Kada bi bilo:  $C_{-1} = C_{N_z+1} = 0$  ( $\varepsilon = \gamma = -1$ ), tada bi granični atomi za  $n_z = 0$  i  $n_z = N_z$  bili „zamrznuti“, tj. javio bi se efekat „krutih zidova“, a ako bi važilo:  $C_{-1} = C_{N_z+1} = C$  ( $\varepsilon = \gamma = 0$ ), bio bi to efekat „slobodnih površina“ [10].

S obzirom na definisani model, hamiltonijan fononskog podsistema opisanog filma u aproksimaciji najbližih suseda ima isti oblik kao i kod neograničenih kristala - izrazi (2.8-10), ali ga je, zbog postojanja graničnih slojeva, zgodno napisati u razdvojenom vidu:

$$H \equiv T + V_{eff}^P + V_{eff}^Z , \quad (3.1)$$

gde je  $T$  - standardan kinetički član. Potencijal koji uključuje interakcije sa graničnim slojevima je oblika:

$$\begin{aligned} V_{eff}^P &= \sum_{\alpha;n_x,n_y} \frac{C_\alpha}{4} \left[ 2 (1 + \varepsilon) (u_{\alpha;n_x,n_y,0})^2 + 2 (1 + \gamma) (u_{\alpha;n_x,n_y,N_z})^2 + \right. \\ &+ 2 (u_{\alpha;n_x,n_y,1} - u_{\alpha;n_x,n_y,0})^2 + 2 (u_{\alpha;n_x,n_y,N_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,N_z-1})^2 + \\ &+ (u_{\alpha;n_x+1,n_y,0} - u_{\alpha;n_x,n_y,0})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,n_y,0} - u_{\alpha;n_x,n_y,0})^2 + \\ &+ (u_{\alpha;n_x,n_y+1,0} - u_{\alpha;n_x,n_y,0})^2 + (u_{\alpha;n_x,n_y-1,0} - u_{\alpha;n_x,n_y,0})^2 + \\ &+ (u_{\alpha;n_x+1,n_y,N_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,N_z})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,n_y,N_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,N_z})^2 + \\ &\left. + (u_{\alpha;n_x,n_y+1,N_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,N_z})^2 + (u_{\alpha;n_x,n_y-1,N_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,N_z})^2 \right] . \end{aligned} \quad (3.2)$$

Potencijal sa interakcijama koje obuhvataju unutrašnje slojeve je onda sledećeg oblika:

$$\begin{aligned} V_{eff}^Z &= \sum_{\alpha;n_x,n_y} \frac{C_\alpha}{4} \left\{ \sum_{n_z=1}^{N_z-1} \left[ (u_{\alpha;n_x+1,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,n_z})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,n_z})^2 + \right. \right. \\ &+ (u_{\alpha;n_x,n_y+1,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,n_z})^2 + (u_{\alpha;n_x,n_y-1,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,n_z})^2 \left. \right] + \\ &+ \left. \sum_{n_z=1}^{N_z-2} (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z+1} - u_{\alpha;n_x,n_y,n_z})^2 + \sum_{n_z=2}^{N_z-1} (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z-1} - u_{\alpha;n_x,n_y,n_z})^2 \right\} \end{aligned} \quad (3.3)$$

Zakon disperzije fonona i u ovom slučaju se nalazi, kao i u prethodnoj glavi, metodom Grinovih funkcija, tražeći Grinovu funkciju istog oblika kao i (2.12) pomoću jednačine kretanja (2.13). Za razliku od (jednostavnije) situacije za idealne strukture, ovde se moraju izračunati odgovarajući komutatori, odnosno odrediti Grinove funkcije posebno za atome graničnih slojeva, a posebno za atome iz unutrašnjosti filma. Koristeći u prethodnoj glavi navedene standardne komutacione relacije za pomeraje i impulse atoma (2.11), kao i ostale neophodne osnovne definicije,

izračunavaju se potrebni komutatori impulsa i hamiltonijana.  
Za donju graničnu površinu za koju je  $m_z = 0$ :

$$\begin{aligned} [p_{\beta; m_x, m_y, 0}, H] &= -i\hbar C_\alpha \left[ (6 + \varepsilon) u_{3; m_x, m_y, 0} - \right. \\ &\quad - u_{\beta; m_x, m_y, 1} - u_{\beta; m_x + 1, m_y, 0} - \\ &\quad \left. - u_{\beta; m_x - 1, m_y, 0} - u_{\beta; m_x, m_y + 1, 0} - u_{\beta; m_x, m_y - 1, 0} \right], \end{aligned} \quad (3.4)$$

za  $1 \leq m_z \leq N_z - 1$ ,

$$\begin{aligned} [p_{\beta; m_x, m_y, m_z}, H] &= -i\hbar C_\alpha \left( 6 u_{\beta, m_x, m_y, m_z} - \right. \\ &\quad - u_{\beta, m_x + 1, m_y, m_z} - u_{\beta, m_x - 1, m_y, m_z} - u_{\beta, m_x, m_y + 1, m_z} - \\ &\quad \left. - u_{\beta, m_x, m_y - 1, m_z} - u_{\beta, m_x, m_y, m_z + 1} - u_{\beta, m_x, m_y, m_z - 1} \right) \end{aligned} \quad (3.5)$$

i konačno, za gornju graničnu površinu za koju je  $m_z = N_z$ , dobijamo:

$$\begin{aligned} [p_{\beta; m_x, m_y, N_z}, H] &= -i\hbar C_\alpha \left[ (6 + \gamma) u_{\beta; m_x, m_y, N_z} - \right. \\ &\quad - u_{\beta; m_x, m_y, N_z - 1} - u_{\beta; m_x + 1, m_y, N_z} - \\ &\quad \left. - u_{\beta; m_x - 1, m_y, N_z} - u_{\beta; m_x, m_y + 1, N_z} - u_{\beta; m_x, m_y - 1, N_z} \right]. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Zamenom nadjenih komutatora u (2.13) i preimenovanjem  $\beta \rightarrow \alpha$ ;  $m \rightarrow n$ , dobija se:

- za  $n_z = 0$ ,

$$\begin{aligned} - M\omega^2 G_{n_x, n_y, 0; m_x, m_y, m_z}^\alpha &= -\frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{n_x, m_x} \delta_{n_y, m_y} \delta_{0, m_z} - \\ - C_\alpha \left[ (6 + \varepsilon) G_{n_x, n_y, 0; m_x, m_y, m_z}^\alpha - G_{n_x, n_y, 1; m_x, m_y, m_z}^\alpha - G_{n_x + 1, n_y, 0; m_x, m_y, m_z}^\alpha - \right. \\ \left. - G_{n_x - 1, n_y, 0; m_x, m_y, m_z}^\alpha - G_{n_x, n_y + 1, 0; m_x, m_y, m_z}^\alpha - G_{n_x, n_y - 1, 0; m_x, m_y, m_z}^\alpha \right], \end{aligned} \quad (3.7)$$

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

$$\begin{aligned} - M\omega^2 G_{n_x, n_y, n_z; m_x, m_y, m_z}^\alpha &= -\frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{n_x, m_x} \delta_{n_y, m_y} \delta_{n_z, m_z} - \\ - C_\alpha \left( 6 G_{n_x, n_y, n_z; m_x, m_y, m_z}^\alpha - G_{n_x + 1, n_y, n_z; m_x, m_y, m_z}^\alpha - G_{n_x - 1, n_y, n_z; m_x, m_y, m_z}^\alpha - \right. \\ \left. - G_{n_x, n_y + 1, n_z; m_x, m_y, m_z}^\alpha - G_{n_x, n_y - 1, n_z; m_x, m_y, m_z}^\alpha - G_{n_x, n_y, n_z + 1; m_x, m_y, m_z}^\alpha - G_{n_x, n_y, n_z - 1; m_x, m_y, m_z}^\alpha \right), \end{aligned} \quad (3.8)$$

- za  $n_z = N_z$ ,

$$\begin{aligned} - M\omega^2 G_{n_x, n_y, N_z; m_x, m_y, m_z}^\alpha &= -\frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{n_x, m_x} \delta_{n_y, m_y} \delta_{N_z, m_z} - \\ - C_\alpha \left[ (6 + \gamma) G_{n_x, n_y, N_z; m_x, m_y, m_z}^\alpha - G_{n_x, n_y, N_z - 1; m_x, m_y, m_z}^\alpha - G_{n_x + 1, n_y, N_z; m_x, m_y, m_z}^\alpha - \right. \\ \left. - G_{n_x - 1, n_y, N_z; m_x, m_y, m_z}^\alpha - G_{n_x, n_y + 1, N_z; m_x, m_y, m_z}^\alpha - G_{n_x, n_y - 1, N_z; m_x, m_y, m_z}^\alpha \right]. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Primenom delimične (zbog narušenja translacione simetrije samo duž  $z$ -pravaca) Furije transformacije:

$$G_{n_x, n_y, n_z; m_x, m_y, m_z}^\alpha \equiv G_{\vec{n}, \vec{m}}(\omega) = \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x, k_y} e^{-ia[(n_x - m_x)k_x + (n_y - m_y)k_y]} G_{n_z, m_z}^\alpha(k_x, k_y; \omega) \quad (3.10)$$

na sistem jednačina (3.7-9), i nakon istovetnih algebarskih operacija koje su iskorišćene na odgovarajućem mestu u prethodnoj glavi, dolazi se do relacija na osnovu kojih se može uspostaviti sledeći sistem algebarskih diferencnih jednačina:

$$\begin{aligned}
 (\varrho_k^\alpha - \varepsilon) G_{0,m_z}^\alpha + G_{1,m_z}^\alpha &= \mathcal{K} \delta_{0,m_z} \\
 G_{0,m_z}^\alpha + \varrho_k^\alpha G_{1,m_z}^\alpha + G_{2,m_z}^\alpha &= \mathcal{K} \delta_{1,m_z} \\
 G_{1,m_z}^\alpha + \varrho_k^\alpha G_{2,m_z}^\alpha + G_{3,m_z}^\alpha &= \mathcal{K} \delta_{2,m_z} \\
 &\vdots && \vdots \\
 G_{n_z-1,m_z}^\alpha + \varrho_k^\alpha G_{n_z,m_z}^\alpha + G_{n_z+1,m_z}^\alpha &= \mathcal{K} \delta_{n_z,m_z} \\
 &\vdots && \vdots \\
 G_{N_z-3,m_z}^\alpha + \varrho_k^\alpha G_{N_z-2,m_z}^\alpha + G_{N_z-1,m_z}^\alpha &= \mathcal{K} \delta_{N_z-2,m_z} \\
 G_{N_z-2,m_z}^\alpha + \varrho_k^\alpha G_{N_z-1,m_z}^\alpha + G_{N_z,m_z}^\alpha &= \mathcal{K} \delta_{N_z-1,m_z} \\
 G_{N_z-1,m_z}^\alpha + (\varrho_k^\alpha - \gamma) G_{N_z,m_z}^\alpha &= \mathcal{K} \delta_{N_z,m_z}
 \end{aligned} \tag{3.11}$$

gde su:  $G_{n_z,m_z}^\alpha \equiv G_{n_z m_z}(k_x, k_y; \omega)$ ,  $\mathcal{K} = \frac{i\hbar}{2\pi C_\alpha}$ ,  $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$  i

$$\varrho_k^\alpha = \frac{\omega^2}{\Omega_\alpha^2} - 4 \sin^2 \frac{ak_x}{2} - 4 \sin^2 \frac{ak_y}{2} - 2 \equiv \varrho. \tag{3.12}$$

Sistem jednačina (3.11) ima rešenja koja mogu da se prikažu u obliku  $G_{a,b} = D_a / D$ , gde je  $D_a$  odgovarajuća zamenska, a  $D$  determinanta sistema (obe kvadratne):

$$\mathcal{D}_{N_z+1}(\varrho) = \left| \begin{array}{ccccccc} \varrho - \varepsilon & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & \varrho & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \varrho & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \varrho & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & \varrho & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & \varrho - \gamma \end{array} \right|_{N_z+1} \tag{3.13}$$

### 3.2 Spektri i stanja fonona u filmu

U skladu sa osnovnim zadatkom ovog istraživanja, a to je određivanje spektra dozvoljenih fononskih energija, koji se dobija iz (3.12) i na osnovu osobina Grinovih funkcija, potrebno je da se odrede polovi traženih Grinovih funkcija. Jasno je da se ovo svodi na određivanje korena (nula) determinante (3.13), odnosno rešavanje jednakosti:

$$\mathcal{D}_{N_z+1}(\varrho; \varepsilon, \gamma) \equiv 0 \implies \varrho = \varrho_\nu(\varepsilon, \gamma); \quad \nu = 1, 2, 3, \dots, N_z + 1. \tag{3.14}$$

Ovaj zadatak u opštem slučaju nije analitički rešiv (može se rešiti numerički za zadate parametre:  $\varepsilon$ ,  $\gamma$  i  $N_z$ ).

U slučaju modela slobodnih površina [10], kada su:  $\varepsilon = \gamma = 0$ , ovaj problem ima analitičko rešenje:

$$\mathcal{D}_{N_z+1}(\varrho) = \varrho \mathcal{P}_{N_z}(\varrho) - \mathcal{P}_{N_z-1}(\varrho) \equiv \mathcal{P}_{N_z+1}(\varrho). \tag{3.15}$$

Determinanta (3.13) sistema jednačina (3.11) se izražava direktno preko karakterističnih polinoma Čebiševa [12] reda  $N_z$ . Iz uslova (3.14) sledi nule Čebiševljevih polinoma (videti [10-12]), a

uzimajući u obzir i izraz (3.12), jednostavnim algebarskim transformacijama dolazi se do izraza koji daje zakon disperzije fonona u tankom (strukturno nedeformisanom) filmu:

$$\mathcal{E}_\nu^\alpha(\vec{k}) \equiv \frac{\omega_\nu^\alpha(\vec{k})}{\Omega_\alpha} = 2 \sqrt{X^2 + Y^2 + Z^2(\nu)} ; \quad (3.16)$$

$$X \equiv X_{k_x} = \sin \frac{ak_x}{2} ; \quad Y \equiv Y_{k_y} = \sin \frac{ak_y}{2} ; \quad Z \equiv Z_{k_z} = Z(\nu) = \sin \frac{ak_z(\nu)}{2} .$$

Na ovaj način, izraz za moguće energije fonona po formi je isti kao izraz (2.19) dobijen za idealne neograničene strukture, s tom razlikom što je tamo  $k_z$  praktično kontinualno promenljivo (u intervalu  $[0, \pi/a]$ ) kao što su  $k_x$  i  $k_y$ , a ovde je izrazito diskretno:

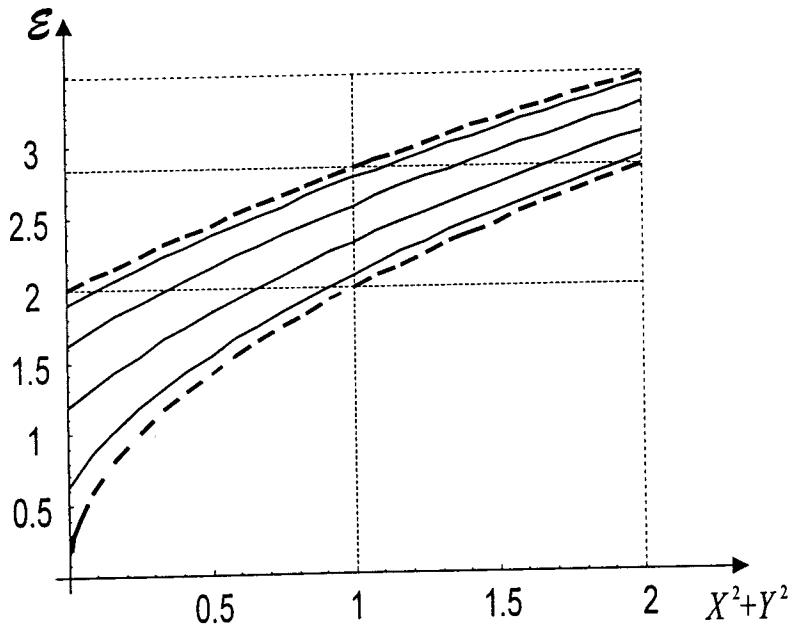
$$k_z(\nu) = \frac{\pi}{a} \frac{\nu}{N_z + 2} ; \quad \nu = 1, 2, 3, \dots, N_z + 1 . \quad (3.17)$$

Pored toga, uočava se da je:  $k_x^{min} = k_y^{min} = 0$ ;  $k_z^{min} \equiv k_z(\nu = 1) = \frac{\pi}{a} \frac{1}{N_z + 2} > 0$ , pošto je u pitanju tanak film, odnosno  $N_z \ll (N_x, N_y)$ , i:  $k_x^{max} = k_y^{max} = \frac{\pi}{a}$ ;  $k_z^{max} \equiv k_z(\nu = N_z + 1) = \frac{\pi}{a} \frac{N_z + 1}{N_z + 2} < \frac{\pi}{a}$ . Izmedju minimalne i maksimalne vrednosti za  $k_z$ , pa prema tome i za  $\mathcal{E}_\nu(\vec{k})$ , postoji još  $N_z - 1$  diskretnih vrednosti<sup>3</sup>. To znači da fononi u tankim filmovima poseduju „donji“ energetski gep:

$$\Delta \equiv \Delta_{min} = \mathcal{E}_1^\alpha(k_x = k_y = 0, k_z = k_z^{min}) = 2 \sin \left[ \frac{\pi}{2(N_z + 2)} \right] , \quad (3.18)$$

kao i „gornji“, ali fizički manje interesantan gep [10].

Na osnovu ovih rezultata zakon disperzije (3.16) grafički je prikazan na slici 3.2 i to: za idealne beskonačne strukture (2.19) - isprekidanim linijama, izmedju kojih je on kontinualan, i za tanki film (3.16) - punim linijama, on je diskretan.



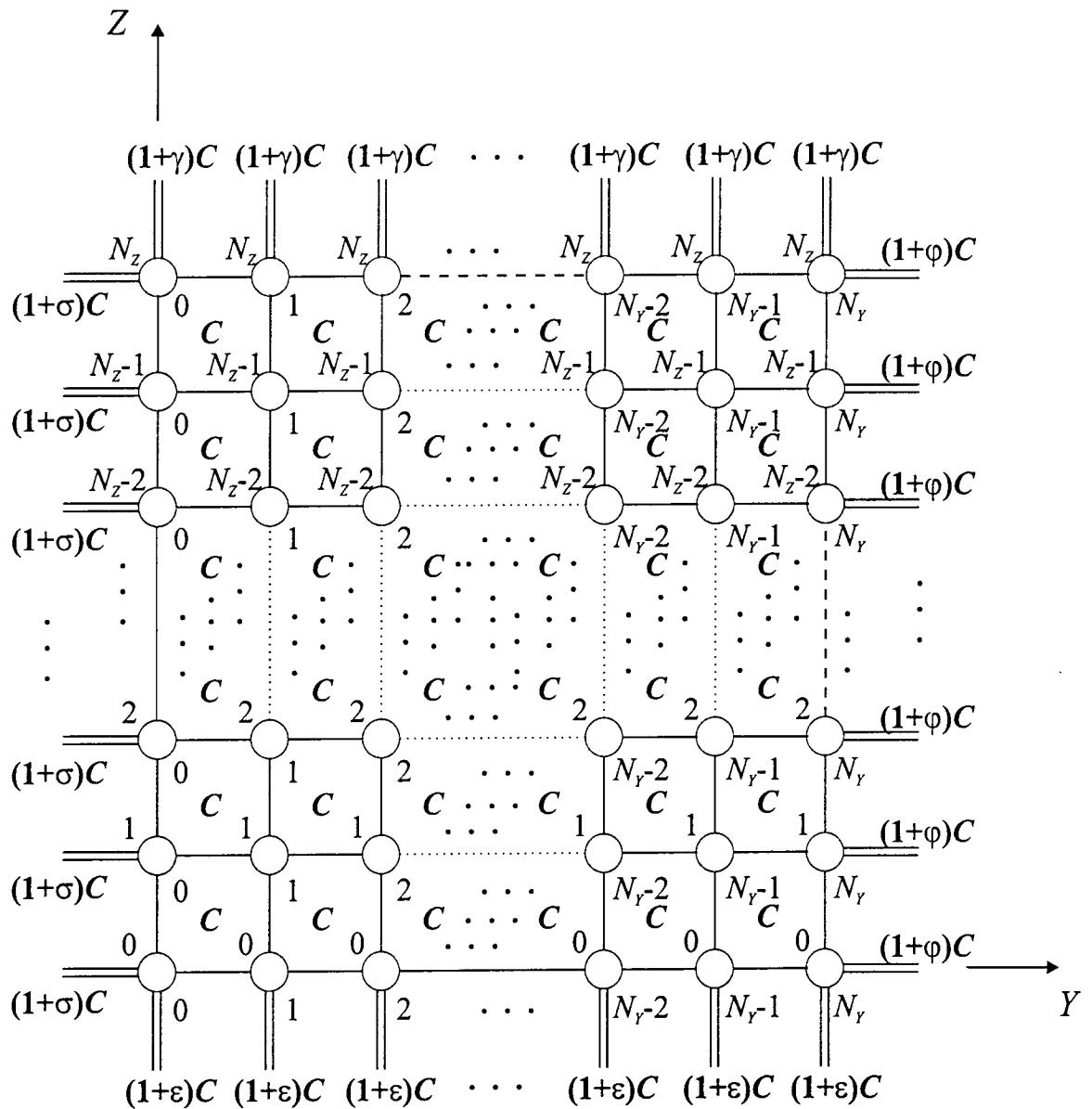
Slika 3.2: Fononski spektar  $\mathcal{E} = \mathcal{E}_\nu (X^2 + Y^2)$  i parametrom  $Z^2(\nu)$

Primetni su gepovi i energetska diskretnost (za film), koji su isključiva posledica postojanja prostornih granica.

<sup>3</sup>Ukupan broj mogućih vrednosti kvaziimpulsa  $k_z$  jednak je broju energetskih i dvodimenzionih podzona:  $N_z + 1$ .

#### 4 Fononi u kvantnim žicama

Kvantne žice predstavljaju ograničene kristalne strukture kod kojih se uslovi na granicama razlikuju od onih u unutrašnjosti, tj. translaciona simetrija narušena je duž pravaca normalnih na žicu ( $z$  i  $y$  pravci).



Slika 4.1: Poprečni presek (duž  $X$ -ravni) modela kvantne žice

Ako unutar žice (izmedju graničnih površina) nema nikakvih deformacija (narušenja) kristalne strukture (kristalna rešetka je bez primesa, vakancija i sl.), onda se ona naziva idealnom žicom [2]. U suprotnom, ako ove deformacije postoje (npr. kao posledice dopingovanja stranim atomima), tada se ta struktura naziva deformisanim žicom.

## 4.1 Formiranje fononskog modela

Posmatra se idealna kvantna žica kubne kristalne strukture načinjena u ili na supstratu nekim tehničko-tehnološkim postupkom (naparavanjem, spaterovanjem i sl.), čiji su osnovni kristalografiski podaci:

$$a_x = a_y = a_z = a ; \quad N_x \sim 10^8 \gg N_{y,z} \sim 10 ;$$

$$\begin{aligned} C_{\vec{n}, \vec{n}}^{\alpha, \alpha} &= C_{\vec{n}, \vec{n} \pm \vec{\lambda}}^{\alpha} \equiv C_{n_x n_y n_z; n_x \pm 1, n_y n_z}^{\alpha} = C_{n_x n_y n_z; n_x n_y \pm 1, n_z}^{\alpha} = \\ &= C_{n_x n_y n_z; n_x n_y n_z \pm 1}^{\alpha} \equiv C^{\alpha} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} C_{n_y 0; n_y, -1}^{\alpha} &= C_{n_y, -1; n_y 0}^{\alpha} = (1 + \varepsilon) C^{\alpha} ; & C_{n_y N_z; n_y N_z + 1}^{\alpha} &= C_{n_y N_z + 1; n_y N_z}^{\alpha} = (1 + \gamma) C^{\alpha} ; \\ C_{0 n_z; -1 n_z}^{\alpha} &= C_{-1 n_z; 0 n_z}^{\alpha} = (1 + \sigma) C^{\alpha} ; & C_{N_y n_z; N_y + 1, n_z}^{\alpha} &= C_{N_y + 1, n_z; N_y n_z}^{\alpha} = (1 + \varphi) C^{\alpha} , \\ (\varepsilon, \gamma, \sigma, \varphi) &\geq -1 . \end{aligned}$$

gde su  $n_{y,z}$  - indeksi rešetke duž  $y$  i  $z$  pravaca i  $n_{y,z} \in (0, 1, 2, \dots, N_{y,z})$ . Na osnovu toga, o modelu se može zaključiti sledeće:

1. Kvantne žice poseduju četiri granične površine: dve paralelne  $XY$  ravnima (i to za  $z = 0$  i  $z = L_z = N_z a$ ) i dve paralelne  $XZ$  ravnima (i to za  $y = 0$  i  $y = L_y = N_y a$ ), dakle, ograničene su duž  $y$  i  $z$  pravaca i neograničene duž  $x$  pravca.
2. Duž  $y$ -ose locirano je  $N_y + 1$  atoma, a duž  $z$ -ose  $N_z + 1$  atoma.
3. Torzionalne konstante  $C^{\alpha\beta}$  zanemarljive su u odnosu na konstante istezanja  $C_{\alpha}$ .
4. Smatra se da atomi, koji pripadaju graničnim slojevima prikazane kvantne žice, interaguju sa spoljašnjim sredinama, bez obzira na to što duž  $y$  i  $z$  pravaca (levo od leve i desno od desne, odnosno, iznad gornje i ispod donje granične površine) nema atoma (motiva, čvorova) žice, ali su granični atomi „spregnuti” izmenjenim Hukovim silama za atome sredina - supstrata koji ih okružuju [1-5]. U skladu sa napred navedenim uslovima, konstante elastičnosti koje opisuju interakcije atoma graničnih površina sa spoljašnjim sredinama, modifikovane su odgovarajućim koeficijentima  $\varepsilon$  i  $\gamma$ ,  $\sigma$  i  $\varphi$ .

Uzimajući u obzir sve ove uslove i činjenice da su slojevi za  $n_y \leq -1$  i  $n_y \geq N_y + 1$ , kao i za  $n_z \leq -1$  i  $n_z \geq N_z + 1$  odsutni, moramo obračunati i sledeće:

$$u_{\alpha; n_x, n_y, n_z} = 0 ; \quad -1 \geq n_{y,z} \wedge n_{y,z} \geq N_{y,z} + 1 ; \quad (n_{y,z} \notin [0, N_{y,z}]) ,$$

S obzirom na definisani model, hamiltonijan fononskog podsistema opisane strukture u aproksimaciji najbližih suseda ima isti oblik kao i kod neograničenih kristala - izrazi (2.8-10), ali ga je, zbog postojanja graničnih slojeva, zgodno napisati u razdvojenom vidu:

$$H = T + V_{eff}^P + V_{eff}^Z , \quad (4.1)$$

gde je  $T$  - standardan kinetički član (2.9),  $V_{eff}^Z$  - član koji opisuje interakcije unutar posmatrane strukture

$$\begin{aligned} V_{eff}^Z &= \sum_{\alpha; n_x} \frac{C_{\alpha}}{4} \sum_{n_y=2}^{N_y-2} \sum_{n_z=2}^{N_z-2} \left[ (u_{\alpha; n_x+1, n_y, n_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z})^2 + (u_{\alpha; n_x-1, n_y, n_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z})^2 + \right. \\ &+ (u_{\alpha; n_x, n_y+1, n_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z})^2 + (u_{\alpha; n_x, n_y-1, n_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z})^2 + \\ &\left. + (u_{\alpha; n_x, n_y, n_z+1} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z})^2 + (u_{\alpha; n_x, n_y, n_z-1} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z})^2 \right] , \end{aligned} \quad (4.2)$$

a  $V_{eff}^P$  - član koji obuhvata interakcije sa graničnim slojevima

$$\begin{aligned}
V_{eff}^P &= \sum_{\alpha; n_x} \frac{C_\alpha}{4} \left\{ 2(1+\varepsilon) \left( u_{\alpha; n_x, 0, 0}^2 + u_{\alpha; n_x, 1, 0}^2 u_{\alpha; n_x, N_y, 0}^2 + u_{\alpha; n_x, N_y-1, 0}^2 \right) + \right. \\
&+ 2(1+\sigma) \left( u_{\alpha; n_x, 0, 0}^2 + u_{\alpha; n_x, 0, 1}^2 u_{\alpha; n_x, 0, N_z}^2 + u_{\alpha; n_x, 0, N_z-1}^2 \right) + \\
&+ 2(1+\gamma) \left( u_{\alpha; n_x, 0, N_z}^2 + u_{\alpha; n_x, 1, N_z}^2 u_{\alpha; n_x, N_y, N_z}^2 + u_{\alpha; n_x, N_y-1, N_z}^2 \right) + \\
&+ 2(1+\varphi) \left( u_{\alpha; n_x, N_y, 0}^2 + u_{\alpha; n_x, N_y, 1}^2 u_{\alpha; n_x, N_y, N_z}^2 + u_{\alpha; n_x, N_y, N_z-1}^2 \right) + \\
&+ (u_{\alpha; n_x+1, 0, 0} - u_{\alpha; n_x, 0, 0})^2 + (u_{\alpha; n_x-1, 0, 0} - u_{\alpha; n_x, 0, 0})^2 + \\
&+ (u_{\alpha; n_x+1, 0, 1} - u_{\alpha; n_x, 0, 1})^2 + (u_{\alpha; n_x-1, 0, 1} - u_{\alpha; n_x, 0, 1})^2 + \\
&+ (u_{\alpha; n_x+1, 1, 0} - u_{\alpha; n_x, 1, 0})^2 + (u_{\alpha; n_x-1, 1, 0} - u_{\alpha; n_x, 1, 0})^2 + \\
&+ (u_{\alpha; n_x+1, 1, 1} - u_{\alpha; n_x, 1, 1})^2 + (u_{\alpha; n_x-1, 1, 1} - u_{\alpha; n_x, 1, 1})^2 + \\
&+ (u_{\alpha; n_x+1, N_y, 0} - u_{\alpha; n_x, N_y, 0})^2 + (u_{\alpha; n_x-1, N_y, 0} - u_{\alpha; n_x, N_y, 0})^2 + \\
&+ (u_{\alpha; n_x+1, N_y, 1} - u_{\alpha; n_x, N_y, 1})^2 + (u_{\alpha; n_x-1, N_y, 1} - u_{\alpha; n_x, N_y, 1})^2 + \\
&+ (u_{\alpha; n_x+1, N_y-1, 0} - u_{\alpha; n_x, N_y-1, 0})^2 + (u_{\alpha; n_x-1, N_y-1, 0} - u_{\alpha; n_x, N_y-1, 0})^2 + \\
&+ (u_{\alpha; n_x+1, N_y-1, 1} - u_{\alpha; n_x, N_y-1, 1})^2 + (u_{\alpha; n_x-1, N_y-1, 1} - u_{\alpha; n_x, N_y-1, 1})^2 + \\
&+ (u_{\alpha; n_x+1, 0, N_z} - u_{\alpha; n_x, 0, N_z})^2 + (u_{\alpha; n_x-1, 0, N_z} - u_{\alpha; n_x, 0, N_z})^2 + \\
&+ (u_{\alpha; n_x+1, 0, N_z-1} - u_{\alpha; n_x, 0, N_z-1})^2 + (u_{\alpha; n_x-1, 0, N_z-1} - u_{\alpha; n_x, 0, N_z-1})^2 + \\
&+ (u_{\alpha; n_x+1, 1, N_z} - u_{\alpha; n_x, 1, N_z})^2 + (u_{\alpha; n_x-1, 1, N_z} - u_{\alpha; n_x, 1, N_z})^2 + \\
&+ (u_{\alpha; n_x+1, 1, N_z-1} - u_{\alpha; n_x, 1, N_z-1})^2 + (u_{\alpha; n_x-1, 1, N_z-1} - u_{\alpha; n_x, 1, N_z-1})^2 + \\
&+ (u_{\alpha; n_x+1, N_y, N_z} - u_{\alpha; n_x, N_y, N_z})^2 + (u_{\alpha; n_x-1, N_y, N_z} - u_{\alpha; n_x, N_y, N_z})^2 + \\
&+ (u_{\alpha; n_x+1, N_y, N_z-1} - u_{\alpha; n_x, N_y, N_z-1})^2 + (u_{\alpha; n_x-1, N_y, N_z-1} - u_{\alpha; n_x, N_y, N_z-1})^2 + \\
&+ (u_{\alpha; n_x+1, N_y-1, N_z} - u_{\alpha; n_x, N_y-1, N_z})^2 + (u_{\alpha; n_x-1, N_y-1, N_z} - u_{\alpha; n_x, N_y-1, N_z})^2 + \\
&+ (u_{\alpha; n_x+1, N_y-1, N_z-1} - u_{\alpha; n_x, N_y-1, N_z-1})^2 + (u_{\alpha; n_x-1, N_y-1, N_z-1} - u_{\alpha; n_x, N_y-1, N_z-1})^2 + \\
&+ 2(u_{\alpha; n_x, 0, 0} - u_{\alpha; n_x, 1, 0})^2 + 2(u_{\alpha; n_x, 0, 0} - u_{\alpha; n_x, 0, 1})^2 + \\
&+ 2(u_{\alpha; n_x, 0, 1} - u_{\alpha; n_x, 1, 1})^2 + 2(u_{\alpha; n_x, 1, 0} - u_{\alpha; n_x, 1, 1})^2 + \\
&+ (u_{\alpha; n_x, 0, 1} - u_{\alpha; n_x, 0, 2})^2 + (u_{\alpha; n_x, 1, 0} - u_{\alpha; n_x, 2, 0})^2 + \\
&+ (u_{\alpha; n_x, 1, 1} - u_{\alpha; n_x, 2, 1})^2 + (u_{\alpha; n_x, 1, 1} - u_{\alpha; n_x, 1, 2})^2 + \\
&+ 2(u_{\alpha; n_x, N_y, 0} - u_{\alpha; n_x, N_y-1, 0})^2 + 2(u_{\alpha; n_x, N_y, 0} - u_{\alpha; n_x, N_y, 1})^2 + \\
&+ 2(u_{\alpha; n_x, N_y, 1} - u_{\alpha; n_x, N_y-1, 1})^2 + 2(u_{\alpha; n_x, N_y-1, 0} - u_{\alpha; n_x, N_y-1, 1})^2 + \\
&+ (u_{\alpha; n_x, N_y, 1} - u_{\alpha; n_x, N_y, 2})^2 + (u_{\alpha; n_x, N_y-1, 0} - u_{\alpha; n_x, N_y-2, 0})^2 + \\
&+ (u_{\alpha; n_x, N_y-1, 1} - u_{\alpha; n_x, N_y-2, 1})^2 + (u_{\alpha; n_x, N_y-1, 1} - u_{\alpha; n_x, N_y-1, 2})^2 + \\
&+ 2(u_{\alpha; n_x, 0, N_z} - u_{\alpha; n_x, 1, N_z})^2 + 2(u_{\alpha; n_x, 0, N_z} - u_{\alpha; n_x, 0, N_z-1})^2 + \\
&+ 2(u_{\alpha; n_x, 0, N_z-1} - u_{\alpha; n_x, 1, N_z-1})^2 + 2(u_{\alpha; n_x, 1, N_z} - u_{\alpha; n_x, 1, N_z-1})^2 + \\
&+ (u_{\alpha; n_x, 0, N_z-1} - u_{\alpha; n_x, 0, N_z-2})^2 + (u_{\alpha; n_x, 1, N_z} - u_{\alpha; n_x, 2, N_z})^2 + \\
&+ (u_{\alpha; n_x, 1, N_z-1} - u_{\alpha; n_x, 2, N_z-1})^2 + (u_{\alpha; n_x, 1, N_z-1} - u_{\alpha; n_x, 1, N_z-2})^2 + \\
&+ 2(u_{\alpha; n_x, N_y, N_z} - u_{\alpha; n_x, N_y-1, N_z})^2 + 2(u_{\alpha; n_x, N_y, N_z} - u_{\alpha; n_x, N_y, N_z-1})^2 + \quad (4.3) \\
&+ 2(u_{\alpha; n_x, N_y, N_z-1} - u_{\alpha; n_x, N_y-1, N_z-1})^2 + 2(u_{\alpha; n_x, N_y-1, N_z} - u_{\alpha; n_x, N_y-1, N_z-1})^2 + \\
&+ (u_{\alpha; n_x, N_y, N_z-1} - u_{\alpha; n_x, N_y, N_z-2})^2 + (u_{\alpha; n_x, N_y-1, N_z} - u_{\alpha; n_x, N_y-2, N_z})^2 + \\
&+ (u_{\alpha; n_x, N_y-1, N_z-1} - u_{\alpha; n_x, N_y-2, N_z-1})^2 + (u_{\alpha; n_x, N_y-1, N_z-1} - u_{\alpha; n_x, N_y-1, N_z-2})^2 +
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_{n_y=2}^{N_y-2} \left[ 2(1+\varepsilon) u_{\alpha;n_x,n_y,0}^2 + (u_{\alpha;n_x,n_y,0} - u_{\alpha;n_x,n_y,1})^2 + \right. \\
& + (u_{\alpha;n_x+1,n_y,0} - u_{\alpha;n_x,n_y,0})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,n_y,0} - u_{\alpha;n_x,n_y,0})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x,n_y+1,0} - u_{\alpha;n_x,n_y,0})^2 + (u_{\alpha;n_x,n_y-1,0} - u_{\alpha;n_x,n_y,0})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x+1,n_y,1} - u_{\alpha;n_x,n_y,1})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,n_y,1} - u_{\alpha;n_x,n_y,1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x,n_y+1,1} - u_{\alpha;n_x,n_y,1})^2 + (u_{\alpha;n_x,n_y-1,1} - u_{\alpha;n_x,n_y,1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x,n_y,0} - u_{\alpha;n_x,n_y,1})^2 + (u_{\alpha;n_x,n_y,1} - u_{\alpha;n_x,n_y,2})^2 + \\
& + 2(1+\gamma) u_{\alpha;n_x,n_y,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+1,n_y,N_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,N_z})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,n_y,N_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,N_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x,n_y+1,N_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,N_z})^2 + (u_{\alpha;n_x,n_y-1,N_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,N_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x,n_y,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,n_y,N_z-2})^2 + (u_{\alpha;n_x,n_y,N_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,N_z-1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x+1,n_y,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,n_y,N_z-1})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,n_y,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,n_y,N_z-1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x,n_y+1,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,n_y,N_z-1})^2 + (u_{\alpha;n_x,n_y-1,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,n_y,N_z-1})^2 \Big] + \\
& + \sum_{n_z=2}^{N_z-2} \left[ 2(1+\sigma) u_{\alpha;n_x,0,n_z}^2 + (u_{\alpha;n_x,0,n_z} - u_{\alpha;n_x,1,n_z})^2 + \right. \\
& + (u_{\alpha;n_x+1,0,n_z} - u_{\alpha;n_x,0,n_z})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,0,n_z} - u_{\alpha;n_x,0,n_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x,0,n_z+1} - u_{\alpha;n_x,0,n_z})^2 + (u_{\alpha;n_x,0,n_z-1} - u_{\alpha;n_x,0,n_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x+1,1,n_z} - u_{\alpha;n_x,1,n_z})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,1,n_z} - u_{\alpha;n_x,1,n_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x,1,n_z+1} - u_{\alpha;n_x,1,n_z})^2 + (u_{\alpha;n_x,1,n_z-1} - u_{\alpha;n_x,1,n_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x,0,n_z} - u_{\alpha;n_x,1,n_z})^2 + (u_{\alpha;n_x,1,n_z} - u_{\alpha;n_x,2,n_z})^2 + \\
& + 2(1+\varphi) u_{\alpha;n_x,N_y,n_z}^2 + (u_{\alpha;n_x,N_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,n_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x+1,N_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,N_y,n_z})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,N_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,N_y,n_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x,N_y,n_z+1} - u_{\alpha;n_x,N_y,n_z})^2 + (u_{\alpha;n_x,N_y,n_z-1} - u_{\alpha;n_x,N_y,n_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x,N_y-1,n_z} - u_{\alpha;n_x,N_y-2,n_z})^2 + (u_{\alpha;n_x,N_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,n_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x+1,N_y-1,n_z} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,n_z})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,N_y-1,n_z} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,n_z})^2 + \\
& \left. + (u_{\alpha;n_x,N_y-1,n_z+1} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,n_z})^2 + (u_{\alpha;n_x,N_y-1,n_z-1} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,n_z})^2 \right] \} ,
\end{aligned}$$

## 4.2 Jednačine kretanja

Zakon disperzije fonona i u ovom slučaju se nalazi, kao i u prethodnim glavama, metodom Grinovih funkcija, tražeći Grinovu funkciju istog oblika kao i (2.12) pomoću jednačine kretanja (2.13). Kao i kod film-struktura i ovde se moraju izračunati odgovarajući komutatori, odnosno odrediti Grinove funkcije posebno za atome graničnih slojeva, a posebno za atome iz unutrašnjosti filma. Koristeći napred navedene standardne komutacione relacije za pomeraje i impulse atoma (2.11), kao i ostale neophodne osnovne definicije, izračunavaju se potrebni komutatori impulsa i hamiltonijana.

1.  $m_z = 0$

- $m_y = 0$

$$\begin{aligned} [p_{\beta;m_x,0,0}, H] &= -i\hbar C_\beta [(6 + \varepsilon + \sigma) u_{\beta;m_x,0,0} - \\ &- u_{\beta;m_x+1,0,0} - u_{\beta;m_x-1,0,0} - \\ &- u_{\beta;m_x,0,1} - u_{\beta;m_x,1,0}], \end{aligned} \quad (4.4)$$

- $1 \leq m_y \leq N_y - 1$

$$\begin{aligned} [p_{\beta;m_x,m_y,0}, H] &= -i\hbar C_\beta [(6 + \varepsilon) u_{\beta;m_x,m_y,0} - u_{\beta;m_x,m_y,1} - \\ &- u_{\beta;m_x+1,m_y,0} - u_{\beta;m_x-1,m_y,0} - \\ &- u_{\beta;m_x,m_y+1,0} - u_{\beta;m_x,m_y-1,0}], \end{aligned} \quad (4.5)$$

- $m_y = N_y$

$$\begin{aligned} [p_{\beta;m_x,N_y,0}, H] &= -i\hbar C_\beta [(6 + \varepsilon + \varphi) u_{\beta;m_x,N_y,0} - \\ &- u_{\beta;m_x+1,N_y,0} - u_{\beta;m_x-1,N_y,0} - \\ &- u_{\beta;m_x,N_y,1} - u_{\beta;m_x,N_y-1,0}], \end{aligned} \quad (4.6)$$

2.  $1 \leq m_z \leq N_z - 1$

- $m_y = 0$

$$\begin{aligned} [p_{\beta;m_x,0,m_z}, H] &= -i\hbar C_\beta [(6 + \sigma) u_{\beta;m_x,0,m_z} - u_{\beta;m_x,1,m_z} - \\ &- u_{\beta;m_x+1,0,m_z} - u_{\beta;m_x-1,0,m_z} - \\ &- u_{\beta;m_x,0,m_z+1} - u_{\beta;m_x,0,m_z-1}], \end{aligned} \quad (4.7)$$

- $1 \leq m_y \leq N_y - 1$

$$\begin{aligned} [p_{\beta;m_x,m_y,m_z}, H] &= -i\hbar C_\beta (6 u_{\beta;m_x,m_y,m_z} - \\ &- u_{\beta;m_x+1,m_y,m_z} - u_{\beta;m_x-1,m_y,m_z} - \\ &- u_{\beta;m_x,m_y+1,m_z} - u_{\beta;m_x,m_y-1,m_z} - \\ &- u_{\beta;m_x,m_y,m_z+1} - u_{\beta;m_x,m_y,m_z-1}), \end{aligned} \quad (4.8)$$

- $m_y = N_y$

$$\begin{aligned} [p_{\beta;m_x,N_y,m_z}, H] &= -i\hbar C_\beta [(6 + \varphi) u_{\beta;m_x,N_y,m_z} - u_{\beta;m_x,N_y-1,m_z} - \\ &- u_{\beta;m_x+1,N_y,m_z} - u_{\beta;m_x-1,N_y,m_z} - \\ &- u_{\beta;m_x,N_y,m_z+1} - u_{\beta;m_x,N_y,m_z-1}], \end{aligned} \quad (4.9)$$

3.  $m_z = N_z$

- $m_y = 0$

$$\begin{aligned} [p_{\beta;m_x,0,N_z}, H] &= -i\hbar C_\beta [(6 + \gamma + \sigma) u_{\beta;m_x,0,N_z} - \\ &- u_{\beta;m_x+1,0,N_z} - u_{\beta;m_x-1,0,N_z} - \\ &- u_{\beta;m_x,0,N_z-1} - u_{\beta;m_x,1,N_z}], \end{aligned} \quad (4.10)$$

- $1 \leq m_y \leq N_y - 1$

$$\begin{aligned} [p_{\beta;m_x,m_y,N_z}, H] &= -i\hbar C_\beta [(6 + \gamma) u_{\beta;m_x,m_y,N_z} - u_{\beta;m_x,m_y,N_z-1} - \\ &- u_{\beta;m_x+1,m_y,N_z} - u_{\beta;m_x-1,m_y,N_z} - \\ &- u_{\beta;m_x,m_y+1,N_z} - u_{\beta;m_x,m_y-1,N_z}], \end{aligned} \quad (4.11)$$

$$\bullet \quad m_y = N_y \quad [p_{\beta;m_x,N_y,N_z}, H] = -i\hbar C_\beta [(6 + \gamma + \varphi) u_{\beta;m_x,N_y,N_z} - \\ - u_{\beta;m_x+1,N_y,N_z} - u_{\beta;m_x-1,N_y,N_z} - \\ - u_{\beta;m_x,N_y,N_z-1} - u_{\beta;m_x,N_y-1,N_z}] . \quad (4.12)$$

Preimenovanjem  $\beta \rightarrow \alpha$ ;  $m \rightarrow n$  i zamenom nadjenih komutatora u jednačinu kretanja

$$-M\omega^2 G_{\vec{n},\vec{m}}^\alpha(\omega) = -\frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{\vec{n},\vec{m}} + \frac{1}{i\hbar} \langle\langle [p_{\alpha;\vec{n}}, H] \mid u_{\alpha;\vec{m}} \rangle\rangle_\omega \quad (4.13)$$

za Grinove funkcije

$$G_{\vec{n},\vec{m}}^\alpha \equiv G_{n_x,n_y,n_z;m_x,m_y,m_z}^\alpha = \langle\langle u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} \mid u_{\alpha;m_x,m_y,m_z} \rangle\rangle ,$$

te primenom delimične Furijeove transformacije (samo duž  $x$ -pravca, gde je posmatrana struktura neograničena)

$$\begin{aligned} G_{n_x n_y n_z; \vec{m}}^\alpha(\omega) &= \frac{1}{N_x} \sum_{k_x} e^{ik_x a(n_x - m_x)} G_{n_y n_z; m_y m_z}^\alpha(k_x; \omega); \\ \delta_{n_x m_x} \delta_{n_y m_y} \delta_{n_z m_z} &= \frac{1}{N_x} \sum_{k_x} e^{ik_x a(n_x - m_x)} \delta_{n_y m_y} \delta_{n_z m_z} , \end{aligned} \quad (4.14)$$

dobija se sistem diferencnih jednačina:

$$1. \quad n_z = 0$$

$$\bullet \quad n_y = 0$$

$$\left[ \left( \frac{\omega}{\Omega_\alpha} \right)^2 - (6 + \varepsilon + \sigma) + 2 \cos ak_x \right] G_{0,0} + G_{1,0} + G_{0,1} = \mathcal{K}_{0,0} \quad (4.15)$$

$$\bullet \quad 1 \leq n_y \leq N_y - 1$$

$$\left[ \left( \frac{\omega}{\Omega_\alpha} \right)^2 - (6 + \varepsilon) + 2 \cos ak_x \right] G_{n_y,0} + G_{n_y+1,0} + G_{n_y-1,0} + G_{n_y,1} = \mathcal{K}_{n_y,0} \quad (4.16)$$

$$\bullet \quad n_y = N_y$$

$$\left[ \left( \frac{\omega}{\Omega_\alpha} \right)^2 - (6 + \varepsilon + \varphi) + 2 \cos ak_x \right] G_{N_y,0} + G_{N_y-1,0} + G_{N_y,1} = \mathcal{K}_{N_y,0} \quad (4.17)$$

$$2. \quad 1 \leq n_z \leq N_z - 1$$

$$\bullet \quad n_y = 0$$

$$\left[ \left( \frac{\omega}{\Omega_\alpha} \right)^2 - (6 + \sigma) + 2 \cos ak_x \right] G_{0,n_z} + G_{1,n_z} + G_{0,n_z+1} + G_{0,n_z-1} = \mathcal{K}_{0,n_z} \quad (4.18)$$

$$\bullet \quad 1 \leq n_y \leq N_y - 1$$

$$\left[ \left( \frac{\omega}{\Omega_\alpha} \right)^2 - 6 + 2 \cos ak_x \right] G_{n_y,n_z} + G_{n_y+1,n_z} + G_{n_y-1,n_z} + G_{n_y,n_z+1} + G_{n_y,n_z-1} = \mathcal{K}_{n_y,n_z} \quad (4.19)$$

$$\bullet \quad n_y = N_y$$

$$\left[ \left( \frac{\omega}{\Omega_\alpha} \right)^2 - (6 + \varphi) + 2 \cos ak_x \right] G_{N_y,n_z} + G_{N_y-1,n_z} + G_{N_y,n_z+1} + G_{N_y,n_z-1} = \mathcal{K}_{N_y,n_z} \quad (4.20)$$

3.  $n_z = N_z$

- $n_y = 0$

$$\left[ \left( \frac{\omega}{\Omega_\alpha} \right)^2 - (6 + \gamma + \sigma) + 2 \cos ak_x \right] G_{0,N_z} + G_{1,N_z} + G_{0,N_z-1} = \mathcal{K}_{0,N_z} \quad (4.21)$$

- $1 \leq n_y \leq N_y - 1$

$$\left[ \left( \frac{\omega}{\Omega_\alpha} \right)^2 - (6 + \gamma) + 2 \cos ak_x \right] G_{n_y,N_z} + G_{n_y+1,N_z} + G_{n_y-1,N_z} + G_{n_y,N_z-1} = \mathcal{K}_{n_y,N_z} \quad (4.22)$$

- $n_y = N_y$

$$\left[ \left( \frac{\omega}{\Omega_\alpha} \right)^2 - (6 + \varphi + \gamma) + 2 \cos ak_x \right] G_{N_y,N_z} + G_{N_y-1,N_z} + G_{N_y,N_z-1} = \mathcal{K}_{N_y,N_z} \quad (4.23)$$

Ovde su:

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

(indeksi  $m_y$  i  $m_z$  su „parazitski” pa su ovde izbačeni). Prilikom izvodjenja prethodnih izraza uzeto je u obzir:  $u_{\alpha;\vec{n}} = 0 \Rightarrow G_{\vec{n},\vec{m}}^\alpha = 0$  za  $\forall n_y, z \notin [0, N_y, z]$ .

### 4.3 Spektri fonona u žici

Sistem diferencnih jednačina (4.15-23) u opštem slučaju nema analitičko rešenje, pa ćemo ga potražiti, kao i kod filmova, za slučaj slobodnih površina kada se površinske perturbacije zanemaruju, tj.  $\varepsilon = \varphi = \gamma = \sigma = 0$ . Uvodjenjem označke:

$$\varrho = \frac{\omega^2}{\Omega_\alpha^2} - 4 \left( 1 + \sin^2 \frac{ak_x}{2} \right); \quad (4.24)$$

pomenuti sistem jednačina može da se napiše u kompaktnijoj formi:

$$\begin{aligned} & G_{n_y-1,n_z} + \\ & + G_{n_y,n_z-1} + \varrho G_{n_y,n_z} + G_{n_y,n_z+1} + \\ & + G_{n_y+1,n_z} = \mathcal{K}_{n_y,n_z}, \end{aligned} \quad (4.25)$$

koja odražava njegov dvodimenzionalni karakter (posebno po  $n_y$  i posebno po  $n_z$ ) i sadrži ukupno  $(N_y + 1) \times (N_z + 1)$  nepoznatih Grinovih funkcija.

Na osnovu opštih algebarskih stavova, jasno je da se nepoznate Grinove funkcije iz (4.25) 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 odgovarajući „zamensku” determinantu, a  $\mathcal{D}_{N_y+1,N_z+1}$  - 2D kvadratnu determinantu sistema:

$$\mathcal{D}_{N_y+1,N_z+1} = \begin{vmatrix} R & J & O & \cdots & O & O & O \\ J & R & J & \cdots & O & O & O \\ O & J & R & \cdots & O & O & O \\ \cdot & \cdot & \cdot & \ddots & \cdot & \cdot & \cdot \\ O & O & O & \cdots & R & J & O \\ O & O & O & \cdots & J & R & J \\ O & O & O & \cdots & O & J & R \end{vmatrix}_{N_y+1} \quad (4.26)$$

gde je:

$$R \equiv R_{N_z+1} = \begin{bmatrix} \varrho & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & \varrho & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \varrho & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \varrho & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & \varrho & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & \varrho \end{bmatrix}_{N_z+1} \quad (4.27)$$

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

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

$$\mathcal{D}_{N_y+1, N_z+1} \equiv 0. \quad (4.28)$$

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 (4.28) se „raspada” na dva uslova:

$$D_{N_y+1} \equiv 0; \quad R_{N_z+1} \equiv 0, \quad (4.29)$$

pri čemu  $D_{N_y+1}$  predstavlja „običnu” determinantu  $\mathcal{D}_{N_y+1, N_z+1}$  u kojoj je  $R$  zamenjen sa  $\varrho$  i  $J$  sa 1. Rešavanjem uslova  $D_{N_y+1} = 0$  dobijaju se vrednosti:

$$\varrho_\mu = -2 \cos ak_y(\mu); \quad k_y(\mu) = \frac{\pi}{a} \frac{\mu}{N_y + 2}; \quad \mu = 1, 2, \dots, N_y + 1, \quad (4.30)$$

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

$$\varrho_\nu = -2 \cos ak_z(\nu); \quad k_z(\nu) = \frac{\pi}{a} \frac{\nu}{N_z + 2}; \quad \nu = 1, 2, \dots, N_z + 1. \quad (4.31)$$

Poznato je [11] da je:

$$\varrho = \varrho_{\nu, \mu} = \varrho_\nu + \varrho_\mu, \quad (4.32)$$

gde je:

$$\varrho = 4\mathcal{E}_k^2 - 4 \left( 1 + \sin^2 \frac{ak_x}{2} \right); \quad \mathcal{E}_k \equiv \mathcal{E}_k^\alpha = \frac{1}{\lambda} \frac{\omega}{\Omega_\alpha}. \quad (4.33)$$

Na osnovu izraza (4.30-33) dobija se zakon disperzije fonona u kvantnim žicama:

$$\mathcal{E}_k^\alpha = 2 \sqrt{\sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y(\mu)}{2} + \sin^2 \frac{ak_z(\nu)}{2}}, \quad (4.34)$$

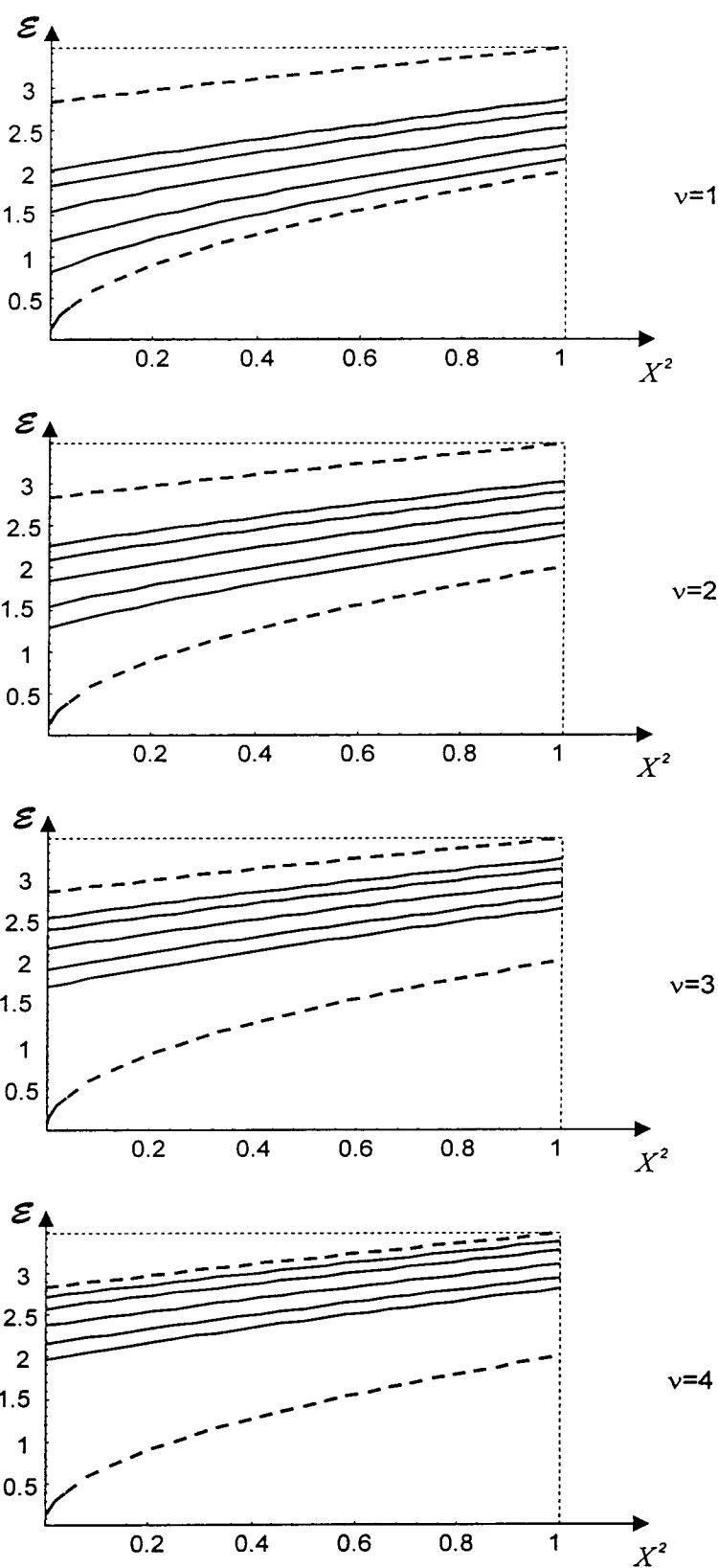
u istoj formi kao kod filmova (3.16) i neograničenih struktura (2.19). Medjutim, vidi se da kvaziimpuls fonona u kvantnim žicama uzima diskrete vrednosti u  $y$  i  $z$ -pravcima, dok je u  $x$ -pravcu praktično kontinualan. Spektar fonona je grafički prikazan na slikama 4.2 i 4.3.

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

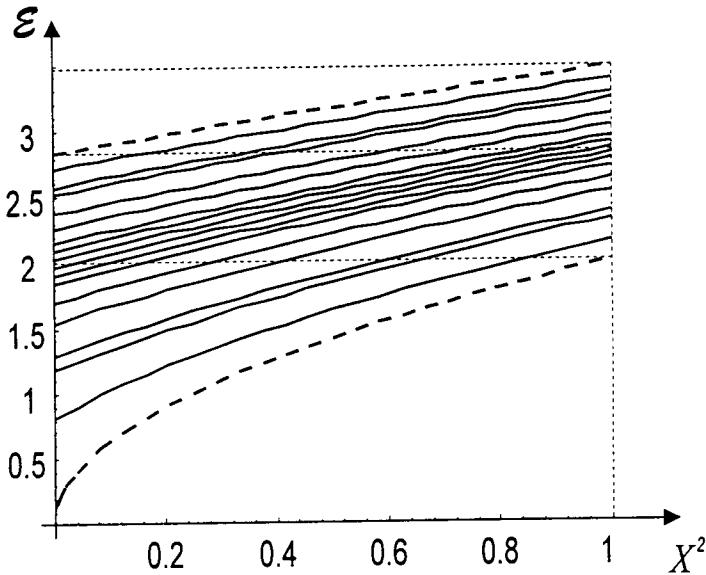
$$\Delta \equiv \Delta_{min} = \mathcal{E}_{k_{min}}^\alpha = \mathcal{E}_{k_x=0, k_y=k_y^{min}, k_z=k_z^{min}}^\alpha = 2 \sqrt{\sin^2 \frac{ak_y^{min}(\mu)}{2} + \sin^2 \frac{ak_z^{min}(\nu)}{2}}, \quad (4.35)$$

$$k_y^{min}(\mu) = k_y(1) = \frac{\pi}{a} \frac{1}{N_y + 2}; \quad k_z^{min}(\nu) = k_z(1) = \frac{\pi}{a} \frac{1}{N_z + 2}. \quad (4.36)$$

Poredjenjem izraza (3.18) i (4.35) za energetske gebove 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 gebovi isčezavaju.



Slika 4.2: Parcijalan fononski spektar  $\mathcal{E} = \mathcal{E}_{\mu,\nu}(X^2)$ ,  $X \equiv \sin(ak_x/2)$



Slika 4.3: Kompletan fononski spektar  $\mathcal{E} = \mathcal{E}_{\mu,\nu}(X^2)$ ,  $X \equiv \sin(ak_x/2)$

Slike 4.2 i 4.3 grafički prikazuju osnovne karakteristike fononskog spektra (dozvoljenih energija) u kvantnim žicama. Ako ih uporedimo sa istim u neograničenim i film-strukturama (slika 3.2) možemo jasno uočiti najbitnije razlike. Prvo, kontinualna zona dozvoljenih fononskih energija balk-struktura (na slikama 3.2, 4.2 i 4.3 ona je prikazana isprekidanim linijama) pod uticajem dveju paralelnih graničnih površina kod filma se cepta na diskretan niz kontinualnih (monoslojnih, ili dvodimenzionih) podzona čiji je broj jednak broju atomskih slojeva izmedju dve granične površine filma. Na slici 3.2 to je prikazano za četvoroslojni film (punim linijama) za  $\nu = 1, 2, 3$  i 4. E sad, u žicama se svaka od tih podzona (posebno za  $\nu = 1$ , za  $\nu = 2$ , pa  $\nu = 3$ , i za  $\nu = 4$ , jer je prikazana kvantna žica sa 4 monoatomska sloja duž jednog pravca ograničenja) cepta na diskretan niz kontinualnih (monolančanih, ili jednodimenzionih) podpodzona čiji je broj jednak broju atomskih slojeva izmedju druge dve granične površine. Na slici 4.2 to je prikazano sa po 5 punih linija, za  $\mu = 1, 2, 3, 4$  i 5, dok su podzonski nivoi prikazani tankim isprekidanim linijama.

Kompletan spektar mogućih (dozvoljenih) diskretnih fononskih energija (zonskih - balkovskih i podpodzonskih - u žicama) za slučaj  $5 \times 4$  slojnih kvantnih žica prikazani su na slici 4.3. Vidi se da dolazi do preklapanja nekih podpodzonskih nivoa koji pripadaju različitim energetskim podzonama.

Pored toga, primetni su dodatni energetske gepovi (za film i za žicu), koji su isključiva posledica postojanja prostornih granica. Veličina gepa za ultratanke film-strukture je odredjena izrazom (3.18), a za kvantne žice (4.35). Njihovim poredjenjem se može zaključiti da je kod žica ovaj (donji) gep za preko 40 % veći.

## 5 Z a k l j u č a k

U radu su istraženi i analizirani energetski spektri (moguća energetska stanja) fonona u kristalnim idealnim beskonačnim, tj. neograničenim i u ograničenim strukturama (filmovima i žicama), sa primitivnom kubnom rešetkom. Na osnovu ovoga se došlo do sledećih važnijih rezultata.

1. Ove analize su pokazale bitne razlike u zakonu disperzije fonona 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 fonona. U odnosu na zonu dozvoljenih energija idealnih struktura sa praktično kontinualnim rasporedom, zona fononskih dozvoljenih energija u filmu je izrazito diskretna. Ona se sastoji od dvodimenzionalih 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 dvodimenziona - duž oba pravca gde postoje granične površine, što znači da se kontinualnost podzona narušava i one dobijaju diskretan karakter.
3. Spektri fonona 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 fononskog sistema i predstavlja najmanju energiju koju treba uložiti da bi se u filmu pojavili akustički fononi (optičkog tipa). Sve do te energije (aktivacione temperature) fononi se mogu nalaziti samo u nekim od vezanih stanja, npr. sa elektronima u Kuperovim parovima. Do te temperature ceo sistem se ponaša kao zamrznut. U kvantnim žicama ovi kvantno-dimenzionalni efekti, pa i aktivaciona temperatura, su znatno izraženiji - veći za preko 40 %.
4. Sve razlike izmedju posmatranih (neograničenih i ograničenih) kristalnih sistema su izraženije, što je film tanji, a žica tanja i uža, i isčezaaju kada debljina filma, odnosno debljina i širina kvantne žice, teže beskonačnosti.

## 6 Literatura

1. D.Raković:  
FIZIČKE OSNOVE I KARAKTERISTIKE ELEKTROTEHNIČKIH MATERIJALA,  
*Elektrotehnički fakultet*, Beograd 1995.
2. Z.Ikonić i V.Milanović:  
POLUPROVODNIČKE KVANTNE MIKROSTRUKTURE,  
*Univerzitet u Beogradu*, Beograd 1997.
3. S.G.Davison and M.Steslicka:  
BASIC THEORY OF SURFACE STATES,  
*Clarendon*, Oxford 1996.
4. M.G.Cottam, D.R.Tilley:  
INTRODUCTION TO SURFACE AND SUPERLATTICE EXCITATIONS,  
*Univ. Press*, Cambridge 1989.
5. Ž.A.Spasojević i Z.V.Popović:  
ELEKTROTEHNIČKI I ELEKTRONSKI MATERIJALI,  
*Promezzia*, Beograd 1995.
6. I.Supek:  
TEORIJSKA FIZIKA I STRUKTURA MATERIJE,  
*Školska knjiga*, Zagreb 1977.
7. C.Kittel:  
QUANTUM THEORY OF SOLIDS,  
*Wiley*, New York 1963.
8. B.S.Tošić:  
STATISTIČKA FIZIKA,  
*Institut za fiziku PMF*, Novi Sad 1978.
9. G.Rickayzen:  
GREEN'S FUNCTIONS AND CONDENSED MATTER,  
*Academic Press*, London 1980.
10. S.Jaćimovski:  
KOLEKTIVNO MEHANIČKO OSCILOVANJE I TERMODINAMIČKE  
OSOBINE SUPERPROVODNIH FILMOVA,  
*Elektrotehnički fakultet*, Beograd 1997.
11. L.A.Gribov:  
THEORY OF INFRARED SPECTRA OF POLYMERS  
*Nauka*, Moskva 1977.
12. D.S.Mitrinović, D.Mihailović i P.M.Vasić:  
LINEARNA ALGEBRA, POLINOMI, ANALITIČKA GEOMETRIJA  
*Gradjevinska knjiga*, Beograd 1990.

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: *Zoran Kecanjević, br.dos. 1001/91*  
AU
- Mentor: *Dr Jovan Šetrajić, redovni profesor, PMF, Novi Sad*  
MN
- Naslov rada: *Fononski 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 D.Obradovića 4, 21000 N.Sad*  
MA
- Fizički opis rada: *(6/26/12/0/3/3/0)*  
FO
- Naučna oblast: *Fizika*  
NO
- Naučna disciplina: *Fizika čvrstog stanja*  
ND
- Predmetna odrednica / ključne reči:  
*kvantne žice, fononi,*  
*Grinove funkcije,*  
*spektri, energetske zone*  
PO
- Čuva se: *Biblioteka Instituta za fiziku,*  
*PMF, Novi Sad*
- Izvod: *U radu je primjenjen metod*  
*Grinovih funkcija za ispitivanje uticaja*  
*graničnih uslova na energetske spektar i*  
*moguća stanja fonona (fononski zakon disperzije)* *kod kvantnih žica sa primitivnom*  
*kubnom ćelijom.*  
*Dobijeni rezultati predstavljeni su grafički*  
*i izvršene su analize, odnosno njihova*  
*poredjenja 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:  
22.02.2000.  
DP
- Datum odbrane:  
07.03.2000.  
DO
- Članovi komisije:
  - Predsednik:  
*Dr Ljiljana Mašković,*  
*redovni profesor, PMF, Novi Sad*
  - Članovi:  
*Dr Jovan Šetrajić,*  
*redovni profesor, PMF, Novi Sad*
  - Dr Željko Škrbić,*  
*vanr.profesor, PMF, Novi Sad*KO