UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET
INSTITUT ZA FIZIKU

Aleksandar S. Utješanović

FONONSKI SPEKTRI I STANJA U FILM-STRUKTURAMA

– DIPLOMSKI RAD –

NOVI SAD, MAJ 1994.

Kada vidiš svet u zrnu peska
i nebo u divljem cvetu,
držiš beskrajnost na dlanu svoje ruke
i večnost u jednom trenu.
William Blake

Priroda ne otkriva svoje tajne
odjednom i svima.
Seneka

Koristim priliku da se zahvalim svojim roditeljima na strpljenju, svom mentoru dr J.P.Šetrajčiću na svesrdnoj pomoći, kao i mr M.Pantiću. Posebno se zahvaljujem našem "razrednom" dr D.Kaporu na brizi tokom studija.

SADRŽAJ

Strana

1. UVOD

Opšti cilj ovog rada je istraživanje fononskih spektara i stanja u idealnim, ali konačnim strukturama, dakle u strukturama bez narušenja translacione simetrije ali uz prisustvo graničnih površina tog sistema. Prirodno se nameće pitanje, zašto se ispituju fononi?

Fononi su osnovna pobudjenja u kristalu, oni su uvek prisutni podsistem bez obzira da li se radi o elektronima, eksitonima, feroelektronskim pobudjenjima ili nekom drugom tipu elementarne eksitacije kao glavnih nosioca mehanizama koji "proizvode" odredjene fizičke osobine, pojave i efekte u kristalu. Takodje, fononi kao podsistem se lako termalno pobudjuju, pa su već sa malim porastom temperature iznad $0K$ oni prisutni.

Pojam fonona se uvodi prilikom kvantnomehaničkih analiza linearnog oscilatora. Energija linearnog oscilatora ima oblik:

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega; \qquad n = 0, 1, 2, \dots$$

a priraštaj energije pri prelasku iz stanja n u stanje n + 1 iznosi:

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

Ovaj kvant pobudjenja linearnog oscilatora, čija energija iznosi $\hbar\omega$, naziva se - **fononom**. Energija fonona zavisi od mase M oscilatora i konstante C koja karakteriše elastičnu silu oscilatora tj.

$$\hbar\omega = \hbar\sqrt{\frac{C}{M}}\,.$$

Oblast istraživanja je ograničena na analizu fonona tj. fononskih stanja u tankim strukturama ili filmovima. Filmovi predstavljaju beskonačne strukture u jednoj ravni sa dve paralelne granične površine duž pravca normalnog na tu ravan.

Poseban naglasak je na tanke filmove , s obzirom da je na današnjem stupnju razvoja tehnike i tehnologije moguće dobiti veoma tanke filmove, debljine reda veličine nekoliko kristalnih medjuatomskih rastojanja.

Rad je posvećen analizi i pregledu najvažnijih fizičkih veličina i njihovog ponašanja za idealne beskonačne strukture. To pre svega sa ciljem da bi dobijeni rezultati i korišćeni metodi našli kasnije primenu i omogućili lakšom analizu struktura u kojima je translaciona simetrija duž jednog pravca narušena.

Najpre, biće ispitan uticaj dveju paralelnih površina duž odredjenog pravca na fononske spektre. Polazeći od standardnog hamiltonijana za fononski sistem, te korišćenjem uobičajenih metoda kvantne teorije fizike čvrstog stanja, dolazi se do sistema jednačina, čijim se rešavanjem (uz pomoć Čebiševljevih polinoma) dobija zakon disperzije fonona kao i moguća fononska stanja u tankom filmu.

U skladu sa činjenicom da, pored konstante elastičnosti, takodje i atomske mase definišu fononske spektre i fononska stanja, lako je zaključiti da fononski spektri mogu biti izmenjeni i sa adekvatnom distribucijom masa duž jednog pravca ili postojanjem konačne debljine strukture duž tog pravca.

Jedan od najvažnijih ciljeva je da se ispita da li su minimalne frekvencije u filmu različite od nule. U slučaju da jesu to bi značilo da u takvim strukturama dolazi do prigušenja ili eliminacije akustičkih fonona, u sistemu onda postoje samo fononi optičkog tipa. To bi imalo za posledicu, da se film ponaša kao "zamrznuta" struktura. Dok se ne postigne odgovarajuća aktivaciona temperatura u filmu, jer do te temperature realni fononi nisu prisutni. Na taj način bi se, npr. elektroni, sve do ovih temperatura u datoj strukturi kretali bez trenja, tj. superprovodno. S obzirom na ovo, prisustvo fononskog gepa bi moglo da predstavlja moguće objašnjenje činjenice da tanki filmovi imaju višu kritičnu temperaturu nego masene strukture i predstavljaju uredjenije termodinamičke sisteme nego masivne strukture.

Prvi deo ovog rada posvećen je kvantnomehaničkom prikazu linearnih oscilacija u pojavi kolektivnih mehaničkih talasa - fonona u idealnim beskonačnim kristalnim strukturama. Date su moguće energije i stanja ovog fononskog sistema. U drugom delu rada analiziran je sličan fononski sistem, ali u uslovima kada je struktura, u kojoj se javljaju ova pobudjenja, ograničena na dve paralelne površine (tzv. film-struktura). Zakon disperzije fonona i talasne funkcije mogućih fononskih stanja su odredjene, a rezultati su uporedjeni sa onima za idealne neogranične strukture da bi se uočio uticaj prisustva granica sistema.

U zaključku rada pobrojani su svi rezultati sprovedenih analiza i dat je njihov komentar.

2. OSCILOVANJE ATOMA KRISTALNE REŠETKE

Energija vibracija kristalne rešetke ili elastičnog talasa, je kvantovana. Kvant energije nekog elastičnog talasa se zove - **fonon**. Zvučni talasi u kristalima su "sastavljeni" od fonona. Toplotne vibracije u kristalima su toplotno pobudjeni fononi.

Kvantna teorija započinje 1900 godine, kada je M. Plank pokazao da jedino kvantovanje energije može objasniti zapažene raspodele frekvencija elektromagnetne energije, izračene crnim telom u toplotnoj ravnoteži. Ajnštajn je pokazao da foto-efekat predstavlja jedan jak dokaz kvantovanja energije svetlosti. Nikakav ogled, direktno analogan fotoelektričnom, nije do sada izveden sa fononima. Fotoefekat ne potvrdjuje da je foton čestica već pokazuje da elektromagnetno polje razmenjuje energiju sa drugim sistemima u nedeljivim elementarnim iznosima od $\hbar\omega$. Ono što možemo saznati na osnovu foto-efekta je da se energija elektromagnetnog polja kvantuje. Ovakvo isto razmatranje važi i za elastične talase (mehaničke talase u elastičnim sredinama).

Kakvi su eksperimentalni dokazi kvantovanja nekog elastičnog talasa? Najvažniji dokazi uključuju sledeće:

1. Udeo rešetke u toplotnom kapacitetu čvrstog tela uvek ide ka nuli kada temperatura ide ka nuli. Ovo jedino može biti objašnjeno kvantovanjem vibracija kristalne rešetke. Ovo je najvažniji dokaz postojanja fonona.

2. X - zraci i neutroni se neelastično rasejavaju na kristalima sa promenama energije i impulsa koje odgovaraju stvaranju ili apsorbovanju jednog ili više fonona. Merenjem "uzmaka" rasejanih x - zraka ili neutrona, odredjuju se svojstva pojedinih fonona. Takvi opiti pružaju najbolji način odredjivanja disperzionih relacija za fonone, tj. daju zavisnost frekvencije od talasnog vektora i predstavljaju dokaz prisustva fonona.

Atomi kristalne rešetke osciluju oko svojih ravnotežnih položaja, pa se kristal u smislu njegovih oscilatornih karakteristika, može tretirati kao niz povezanih oscilatora. Zbog ove povezanosti jedan atom pri svom oscilovanju trpi uticaj svih ostalih atoma koji ga okružuju i istovremeno i sam utiče na njihovo oscilovanje, tako da svaki kvant oscilovanja u kristalu nosi pečat celokupnog kolektiva atoma i sila koje izmedju njih deluju. Zbog toga se u kristalima ne može govoriti o fononima kao pobudjenjima individualnih atoma već o fononima koji predstavljaju kvante oscilovanja celog kristala.

2.1 LHO u reprezentaciji druge kvantizacije

Reprezentacija druge kvantizacije za neki kvantni sistem je takva matematička formulacija karakteristika sistema u kojoj se stanja sistema izražavaju u zavisnosti od broja kvanata elementarnih pobudjenja u sistemu i operatora fizičkih veličina koji menjaju taj broj kvanata u sistemu.

Za linearni oscilator kvantni sistem su fononi a kvantni broj n karakteriše broj fonona u sistemu. Da bi formalizam druge kvantizacije bio kompletan neophodno je uvesti operatore koji utiču na broj fonona i menjaju ga i preko tih operatora se mora izraziti hamiltonijan ukupnog sistema.

U ovako opisanoj reprezentaciji, očigledno, postoji mogućnost da se za dati broj fonona odredi energija sistema, a nešto drugo, nam sa fizičke tačke gledišta nije ni neophodno.

Ne treba pomisliti da reprezentacija druge kvantizacije daje nešto novo u odnosu na koordinatnu reprezentaciju koja je ovde detaljno obradjena. Ona samo predstavlja novu matematičku sliku problema koji uprošćava proračune potrebnih fizičkih veličina. Dakle, u osnovi metoda druge kvantizacije leži ideja da se proračun verovatnoća kvantnih stanja zameni prebrojavanjem čestica u ovim stanjima.

U prvoj fazi analize LHO uvodi se hamiltonijan klasičnog oscilatora

$$H(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 , \tag{2.1}$$

a rešavanje njegovog svojstvenog problema:

$$H(x)\Phi(x) = E\Phi(x) \tag{2.2}$$

svodi se na rešavanje Šredingerove jednačine:

$$\frac{d^2\Phi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - \frac{1}{2}m\omega^2x^2)\Phi = 0 ; \quad -\infty < x < \infty \tag{2.3}$$

Smenom $x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\xi$ i $\mathcal{E} = \frac{2E}{\hbar\omega}$ ona se svodi na poznatu Ermit-Veberovu jednačinu:

$$\frac{d^2\Phi}{d\xi^2} + (\mathcal{E} - \xi^2)\Phi = 0 \tag{2.4}$$

Funkcija $\Phi(x)$ mora biti jednoznačna, neprekidna i po modulu kvadratno-integrabilna. Njeno rešenje je oblika:

$$\Phi(\xi) \equiv \Phi_n(\xi) = C_n e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi) \; ; \qquad C_n = \sqrt{\frac{1}{2^n n!}\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar\pi}}} \tag{2.5}$$

i zove se Ermitova funkcija, a $H_n(\xi)$ je Ermitov polinom konačnog reda. Sve ovo važi pod uslovom da je:

$$\mathcal{E} \equiv \mathcal{E}_n = 2n + 1 \; ; \qquad n = 0, 1, 2, \ldots \tag{2.6}$$

Dakle, n je ceo pozitivan broj i definiše rešenje (2.5) koje ispunjava sve kvantnomehaničke zahteve. Iz (2.6) sledi da se moguće energije sistema izražavaju kao:

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega = (n + \frac{1}{2})h\nu \tag{2.7}$$

To znači da energija LHO ne može da bude bilo kakva. Po Planku, postoje konačni kvanti energija E, tako da energija oscilatora može da bude jednaka samo celobrojnim umnošcima najmanjeg iznosa energije ΔE_0 i pri zračenju ili apsorbovanju energije, LHO prelazi iz jednog od ovih stanja u drugo skokom $\Delta E_0 = h\nu$, tj. $\Delta E = nh\nu$; $n = 1, 2, 3, \ldots$. Po Planku oscilator može da ima i nultu energiju osnovnog stanja a po kvantnoj mehanici ne može. Hajzenbergov princip neodredjenosti ne dozvoljava nultu energiju oscilatora.

Zamenom (2.5) u jednačinu (2.4) dobija se diferencijalna jednačina po $H_n(\xi)$:

$$H_n'' - 2\xi H_n' + 2nH_n = 0 \, , \tag{2.8}$$

čije se rešenje može potražiti u obliku:

$$H(\xi) = \xi^s(a_0 + a_1\xi + a_2\xi^2 + \ldots) \; ; \qquad a_0 \neq 0 \; ; \qquad s \geq 0 \tag{2.9}$$

$$\begin{aligned}
&s(s-1)a_0 = 0 \\
&(s+1)sa_1 = 0 \\
&(s+2)(s+1)a_2 - (2s+1-n)a_0 = 0 \\
&(s+3)(s+2)a_3 - (2s+3-n)a_1 = 0 \\
&\quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \\
&\quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \\
&\quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \\
&(s+\nu+2)(s+\nu+1)a_{\nu+2} - (2s+2\nu+1-n)a_\nu = 0
\end{aligned} \tag{2.10}$$

gde je ν ceo broj, $n = 2s + 2\nu + 1$, ν mora biti parno jer je $a_0 \neq 0$, inače bi članovi sa parnim indeksima formirali beskonačan red.

Ako se označi odgovarajući polinom sa $H_n(\xi)$ vidi se da je H_n stepena n po ξ i da je paran ili neparan, prema tome da li je n parno ili neparno. Svojstvena funkcija $\Phi(\xi)$ ima parnost odredjenu sa n i ima n čvorova . H_n može da se izrazi preko funkcije generatrise $G(\xi,t)$:

$$G(\xi,t) \equiv e^{2\xi\cdot t-t^2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{H_n(\xi)}{n!}t^n \quad\Longrightarrow\quad H_n(\xi)=\left[\frac{\partial^n G(\xi,t)}{\partial t^n}\right]_{t=0} \tag{2.11}$$

Da bi se proverilo da li H_n zadovoljava diferencijalnu jednačinu (2.8) potrebno je prvo da se diferencira obe strane jednačine (2.11) po ξ i po t a izjednačavajući koeficijente uz jednake stepene od t u sumama u te dve jednačine dobiju se dve rekurentne relacije za Ermitove polinome:

$$H_n' = 2nH_{n-1} \tag{2.12}$$

$$H_{n+1} = 2\xi H_n - 2nH_{n-1} \tag{2.13}$$

Diferencijalna jednačina najnižeg reda koja se može formirati iz tih dveju jednačina poklapa se sa jednačinom (2.8). Znači da funkcije diferencijalne jednačine (2.11) predstavljaju Ermitove polinome. Za bilo koju funkciju $f(t-\xi)$ važi veza:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{\partial f}{\partial \xi}$$

Ako se $G(\xi,t)$ diferencira n puta po t:

$$\frac{\partial^n G}{\partial t^n} = (-1)^n e^{\xi^2}\frac{\partial^n}{\partial \xi^n}e^{-(t-\xi)^n}$$

a zatim se stavi $t=0$, jednačina za $G(\xi,t)$ pokazuje da je rezultat prosto H_n.

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2}\frac{\partial^n}{\partial \xi^n}e^{-\xi^n}\ . \tag{2.14}$$

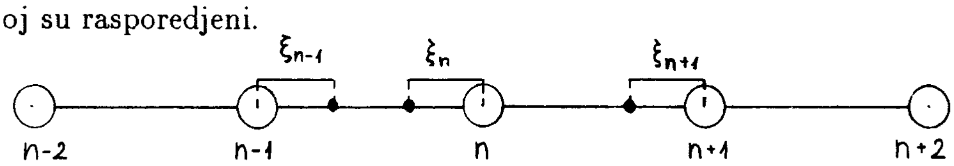
Ovaj izraz predstavlja Rodrigezov obrazac. Analiza izraza (2.5) i (2.7) pokazuje da je spektar LHO diskretan i nedegenerisan, što znači da jednoj energiji E_n odgovara jedna i samo jedna linearno nezavisna funkcija $\Phi_n(\xi)$. Svojstvene funkcije $\Phi_n(\xi)$ su ortonormirane.

$$\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\int_{-\infty}^{+\infty} d\xi\,\Phi_n(\xi)\Phi_m(\xi) = \delta_{nm} \tag{2.15}$$

Spektar LHO je ekvidistantan, tj. $E_{n+1}-E_n=\hbar\omega$. Zahvaljujući toj ekvidistantnosti, može se uvesti pojam fonona kao jediničnog kvanta mehaničkih oscilacija. Svaki ovaj kvant "nosi" energiju $\hbar\omega$. Prebrojavanjem fonona može da se odredi energija oscilatora.

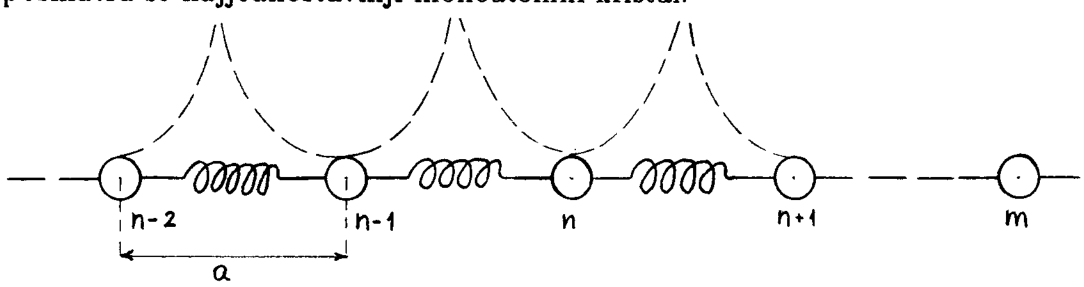
2.2 Fononi u kristalnoj rešetki

Zamislimo jednodimenzioni niz atoma iste mase m na jednakim medjusobnim rastojanjima a, koji vrši male oscilacije oko svojih ravnotežnih položaja duž linije po kojoj su rasporedjeni.



Ovo predstavlja jednodimenzioni model kristala. Iako takvih kristala u prirodi nema, razmatranje ovog modela omogućava da se shvati priroda kretanja u realnim kristalima. Posmatranjem kretanja atoma može se pokazati da je taj sistem ekvivalentan jednom skupu medjusobno nezavisnih LHO.

Fizički procesi u kristalu povezani su sa toplotnim kretanjem atoma blizu svojih idealizovanih položaja ravnoteže. Da bi se napisao hamiltonijan fononskog sistema posmatra se najjednostavniji monoatomni kristal:



a-konstanta kristalne rešetke, $V(\vec{n}-\vec{m})$- potencijal interakcije izmedju dva atoma na mestima $\vec{n}$ i $\vec{m}$.

Hamiltonijan sistema je:

$$H = \sum_{\vec{n}} H_{\vec{n}} + \frac{1}{2}\sum_{\vec{n},\vec{m}} V(\vec{n}-\vec{m}) \tag{2.16}$$

$H_{\vec{n}}$ - hamiltonijan izolovanog atoma, $V_{\vec{n}-\vec{m}}$ je parna funkcija pa važi $V_{\vec{n}-\vec{m}} = V_{\vec{m}-\vec{n}}$.

Atomi kristalne rešetke osciluju oko svojih ravnotežnih položaja zbog elastičnih sila pri kojima na svaki atom deluju ostali iz kristalne rešetke, pa se kristal može tretirati kao sistem povezanih oscilatora. Tako nastaje elastični talas, a energija tog elastičnog sistema može imati samo diskretne vrednosti $\hbar\omega(n+\frac{1}{2})$.

Svakom odvojenom kvantu energije talasa $E_g = \hbar\omega_g$ može se pripisati impuls $p_g = \hbar k_g$. Uveden na taj način, kvant energije kojim se prenosi zvučni talas zove se - **fonon**. Zbog medjusobne povezanosti, jedan atom trpi uticaj svih ostalih atoma koji ga okružuju, pa zbog kvantovanosti tog oscilovanja onda svaki kvant tog oscilovanja nosi pečat celokupnog kolektiva atoma, te se u kristalu ne može govoriti o fononima kao pobudjenjima individualnih atoma, već o fononima koji predstavljaju kvante oscilovanja celog kristala.

Ispitivanje oscilatornih karakteristika kristala, svodi se na traženje takve unitarne transformacije, koja bi hamiltonijan sistema vezanih oscilatora prevela u ekvivalentni hamiltonijan sistema nezavisnih oscilatora. Izraz za interakcioni član u (2.16), koji predstavlja potencijalnu energiju kristala,

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

ispravan je samo na apsolutnoj nuli, tj. za "zamrznuti" kristal. Ako se temperatura povisi, atomi počinju da osciluju tako da:

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

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

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

S obzirom da su na niskim temperaturama pomeraji $\vec{u}(\vec{n})$ mali, koristeći standardnu teoriju malih oscilacija, razvija se funkcija $V(\vec{n}-\vec{m})$ u Tejlorov red, po malim pomerajima oko položaja ravnoteže:

$$V\{(\vec{n}-\vec{m}) + [\vec{u}(\vec{n}) - \vec{u}(\vec{m})]\} = V_0(\vec{n}-\vec{m}) + \sum_{\vec{n},\vec{m},\alpha}\left[\frac{\partial V(\vec{n}-\vec{m})}{\partial(\vec{n}-\vec{m})}\right]_0 [u_\alpha(\vec{n}) - u_\alpha(\vec{m})] +$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{\vec{n},\vec{m},\alpha,\beta}\left[\frac{\partial^2 V(\vec{n}-\vec{m})}{\partial(\vec{n}-\vec{m})_\alpha \partial(\vec{n}-\vec{m})_\beta}\right]_0 [u_\alpha(\vec{n}) - u_\alpha(\vec{m})][u_\beta(\vec{n}) - u_\beta(\vec{m})] + \ldots$$

α, β 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 sa desne strane znaka jednakosti jednak nuli. Dakle, oscilovanje karakteriše samo treći sabirak tzv. harmonijski član. Ako se ovaj član sumira po svim čvorovima i doda mu se kinetička energija $\sum_{\vec{n},\alpha} \frac{M}{2}\dot{u}_\alpha^2(\vec{n})$, dobija se oscilatorni hamiltonijan sistema u obliku:

$$H = \sum_{\vec{n},\alpha} \frac{M}{2}\dot{u}_\alpha^2(\vec{n}) + \frac{1}{4}\sum_{\vec{n},\vec{m},\alpha,\beta} C_{\alpha,\beta}(\vec{n}-\vec{m})[u_\alpha(\vec{n}) - u_\alpha(\vec{m})][u_\beta(\vec{n}) - u_\beta(\vec{m})] \quad (2.17)$$

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 najčeše brzo opadaju sa rastojanjem $|\ \vec{n}-\vec{m}\ |$ izmedju atoma, to se za potencijalnu energiju može napisati na sledeći način:

$$V(\vec{n}-\vec{m}) \sim \frac{1}{|\ \vec{n}-\vec{m}\ |^\alpha} \qquad \alpha > 1$$

Tada se izraz za potencijalnu energiju može napisati u aproksimaciji najbližih suseda, koja se sastoji u zameni sumiranja $\vec{n}, \vec{m} \longrightarrow \vec{n}, \vec{\lambda}$, 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 $C_{\alpha,\beta}(\vec{\lambda})$ zapravo ne zavisi od $\vec{\lambda}$. Tada hamiltonijan (2.17) postaje :

$$H = \sum_{\vec{n},\alpha} \frac{M}{2} \dot{u}_{\alpha}^{2}(\vec{n}) + \frac{1}{4} \sum_{\vec{n},\vec{\lambda},\alpha,\beta} C_{\alpha,\beta} \left[u_{\alpha}(\vec{n}) - u_{\alpha}(\vec{n}-\vec{\lambda})\right] \left[u_{\beta}(\vec{n}) - u_{\beta}(\vec{n}-\vec{\lambda})\right] \qquad (2.18)$$

Ukupni operator potencijalne energije je:

$$\tilde{V} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{n},\vec{m}} V_{\vec{n}-\vec{m}} + \frac{1}{4} \sum_{\vec{n},\vec{m},\alpha\beta} C_{\alpha,\beta} (u_{\vec{n}} - u_{\vec{m}})^2$$

gde prvi član ne utiče na pomeranje atoma a drugi član je odgovaran za oscilovanje atoma, pa je :

$$\tilde{V}_{eff} = \frac{1}{4} \sum_{\vec{n},\vec{m},\alpha\beta} C_{\alpha,\beta} (u_{\vec{n}} - u_{\vec{m}})^2$$

gde je $C_{\alpha,\beta} = [\frac{d^2 V_{\vec{n}-\vec{m}}}{d(\vec{n}-\vec{m})^2}]_{u_{\vec{n}} - u_{\vec{m}}} = 0$. Ako se napiše $\tilde{V}_{eff}$ u aproksimaciji najbližih suseda i za jednodimenzioni slučaj idealnog kristala, sledi:

$$\tilde{V}_{eff} = \frac{1}{4} \sum_{n} \left[C_{n-(n-1)} (u_n - u_{n-1})^2 + C_{n-(n+1)} (u_n - u_{n+1})^2\right]$$

Stavljanjem $C_1 = C_{-1} = C_0$, jer zavisi samo od rastojanja izmedju susednog levog i desnog atoma (a ono je isto), ovaj izraz se svodi na:

$$\tilde{V}_{eff} = \frac{C_0}{4} \left[\sum_{n} (u_n - u_{n-1})^2 + \sum_{m} (u_n - u_{n+1})^2\right]$$

$n - 1 = m \rightarrow n$, m po pravilu povlači za sobom promenu granica za 1 , ali kako u rešetki ima $N \sim 10^8$ atoma to tu jedinicu možemo zanemariti, pa sledi:

$$\tilde{V}_{eff} = \frac{1}{2} C_0 \sum_{n} (u_n - u_{n+1})^2$$

Sila koja deluje na n-ti atom računa se kao:

$$F_n = -\frac{\partial \tilde{V}_{eff}}{\partial u_n}$$

gde je $\tilde{V}_{eff}$ efektivna potencijalna energija uzajamnog dejstva, koja zavisi od pomeranja svih atoma, pa sledi:

$$F_n = C_0 (u_{n-1} + u_{n+1} - 2u_n) \ ,$$

ili uopštenije:

$$F(\vec{n}) = C_0 \left[u_\beta(\vec{n} - \vec{\lambda}) + u_\alpha(\vec{n} + \vec{\lambda}) - 2u_\beta(\vec{n})\right] \tag{2.19}$$

Koristeći formalizam klasične teorijske mehanike, dobija se jednačina kretanja za pomeraje atoma oko ravnotežnih položaja:

$$M\ddot{u}_\alpha(\vec{n}) = \frac{1}{2}\sum_{\vec{\lambda},\beta} C_{\alpha,\beta}\left[u_\beta(\vec{n} - \vec{\lambda}) + u_\alpha(\vec{n} + \vec{\lambda}) - 2u_\beta(\vec{n})\right] , \tag{2.20}$$

a rešenje ovog sistema jednačina traži se u obliku ravnih talasa:

$$u_\alpha(\vec{n}) = A_\alpha(\vec{k})e^{i(\vec{k}\vec{n} - \omega t)} . \tag{2.21}$$

gde je $A_\alpha(\vec{k})$ - amplituda tih talasa. Smena (2.21) u (2.20) vodi na homogen sistem od tri algebarske jednačine za nepoznate amplitude $A_\alpha(\vec{k})$:

$$\sum_\beta [\omega^2\delta_{\alpha,\beta} - f(\vec{k})C_{\alpha,\beta}]A_\beta(\vec{k}) = 0 \; ; \quad \alpha, \beta \in (x, y, z) , \tag{2.22}$$

gde je:

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

Zbog uslova netrivijalnosti ovih rešenja, determinanta sistema (2.22) mora biti jednaka nuli, tj.

$$det \parallel \omega^2\delta_{\alpha,\beta} - f(\vec{k})C_{\alpha,\beta} \parallel = 0 .$$

Ovaj uslov daje za svaku vrednost $\vec{k}$ tri pozitivna rešenja za dozvoljene frekvencije ω. Vidi se da frekvencije ω zavise od mase atoma M i Hukovih konstanti elastičnosti $C_{\alpha,\beta}$, kao i kod izolovanog oscilatora, ali se razlikuju po tome što zavise od talasnog vektora $\vec{k}$. Može se reći da u kristalu postoji čitav spektar frekvencija $\omega = \omega(\vec{k})$ čije vrednosti zavise od talasnih dužina mehaničkih talasa koji se prostiru kroz kristal. Kompletno rešenje diferencijalne jednačine (2.20) je linearna kombinacija tipa:

$$u_\alpha(\vec{n}) = \sum_k A(\vec{k})\left\{b_k e^{i(kna - \omega_k t)} + b_k^+ e^{-i(kna - \omega_k t)}\right\} \tag{2.23}$$

Hamiltonijan $H = T + \tilde{V}_{eff}$; ovog sistema je:

$$T = \frac{M}{2}\sum_n \dot{u}_n^2 \; ; \quad \tilde{V}_{eff} = \frac{C_0}{2}\sum_n (u_n - u_{n+1})^2$$

Ako se potraži $\dot{u}_n$ i zamene odgovarajući pomeraji iz (2.23) u poslednje jednačine uz:

$$\sum_n e^{ina(k+k')} = N\delta_{k',-k} \; ; \quad \sum_n e^{ina(k-k')} = N\delta_{k',k}$$

$$\sum_n e^{-ina(k-k')} = N\delta_{k',k} \; ; \quad \sum_n e^{-ina(k+k')} = N\delta_{k',-k}$$

$$\omega_k = -\omega_k \; ; \qquad A(\vec{k}) \equiv A_k = A_{-k}$$

dobija se:

$$T = \sum_k \frac{NM\omega_k^2 A_k^2}{2} \left\{ b_k b_k^+ + b_k^+ b_k - b_k b_{-k} e^{-2\omega_k t} - b_k^+ b_{-k}^+ e^{2\omega_k t} \right\}$$

$$u_n - u_{n+1} = \sum_k A_k \left\{ b_k e^{i(kna-\omega_k t)}(1 - e^{ika}) + b_k^+ e^{-i(kna-\omega_k)t}(1 - e^{-ika}) \right\}$$

$$\tilde{V}_{eff} = \frac{C_0}{2} \sum_{k,k'} A_k A_{k'} \left\{ b_k b_{k'} e^{-i(\omega_k+\omega_{k'})t}(1 - e^{ika})(1 - e^{ik'a}) \sum_n e^{ina(k+k')} + \right.$$

$$+ b_k^+ b_{k'} e^{-i(\omega_k-\omega_{k'})t}(1 - e^{ika})(1 - e^{-ik'a}) \sum_n e^{ina(k-k')} +$$

$$+ b_k^+ b_{k'} (1 - e^{-ika})(1 - e^{ik'a}) e^{i(\omega_k-\omega_{k'})t} \sum_n e^{-ina(k-k')} +$$

$$\left. + b_k^+ b_{k'}^+ (1 - e^{-ika})(1 - e^{-ik'a}) e^{i(\omega_k+\omega_{k'})t} \sum_n e^{-ina(k+k')} \right\}$$

Nakon neophodnih sumiranja i uz uvršćavanje komutacione relacije $\left[b_k, b_k^+\right] = 1$ sledi:

$$H = \sum_k 2NMA_k^2\omega_k^2(b_k^+ b_k + \frac{1}{2})$$

Ako se nepoznate amplitude A_k odrede tako da je $\hbar = 2NMA_k^2\omega_k^2$ dobija se konačno::

$$H = \sum_k (b_k^+ b_k + \frac{1}{2})\hbar\omega_k \tag{2.24}$$

Sistem uzajamno zavisnih oscilatora sveden je na problem jednog oscilatora. Bitna razlika u odnosu na običan oscilator ($\omega_0 = const.$) je što ovde imamo zakon disperzije ω_k za fonone u kristalnoj rešetki, koji je oblika:

$$\omega(k) = 2\sqrt{\frac{C}{M}} \sin\frac{ka}{2} \; . \tag{2.25}$$

Da bi se uočila svojstva oscilovanja kristalne rešetke posmatraćemo najprostiji slučaj. To je linearan niz atoma, tj. jednodimenziona rešetka, kod koje na svaku elementarnu ćeliju dolazi po jedan atom koji interaguje samo sa najbližim susedima. U tom slučaju jednačina kretanja (2.20) ima oblik:

$$M\ddot{u}_n = C(u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n) \; ,$$

čije rešenje je oblika :

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

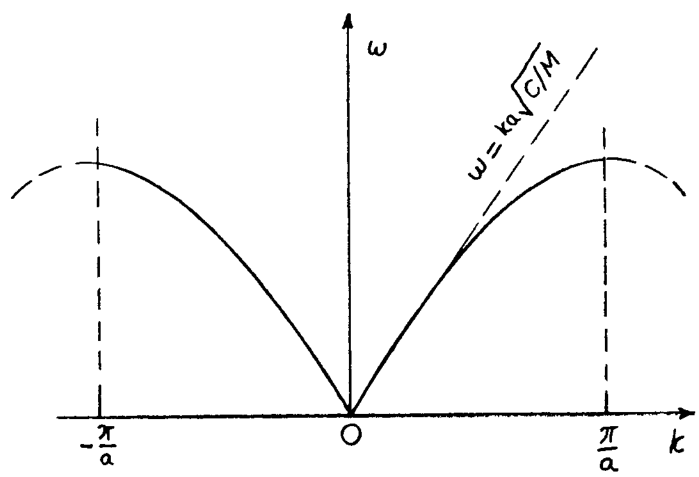
Na osnovu ovoga mogu se izvesti sledeći zaključci:

a) Pri $ka \ll 1$ jednačina (2.25) postaje:

$$\omega(k) \sim \sqrt{\frac{C}{M}}\, ak .$$

Zavisnost ω od k je linearna, sem u slučaju većih vrednosti k, kada $\omega(k)$ postaje nelinearna. Postoji maksimum iznad kojeg ni za jedno k nema oscilacija i zavisnost $\omega(k)$ je periodična za svaki talas k', tj.

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



b) Interval nezavisnih vrednosti k može se specificirati birajući k iz intervala :

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

Ovaj interval je poznat kao prva Briluenova zona jednodimenzione rešetke.

c) Pri velikim vrednostima k brzina talasa ne ostaje konstantna i dolazi do odstupanja od linearne zavisnosti i to svojstvo se zove - **disperzija**.

Nešto složeniji slučaj je linearni niz atom koji se nalaze na istom rastojanju i sa istim konstantama elastičnosti ali različitim masama M_1 i M_2, naizmenično rasporedjenim. Jednačine kretanja postaju:

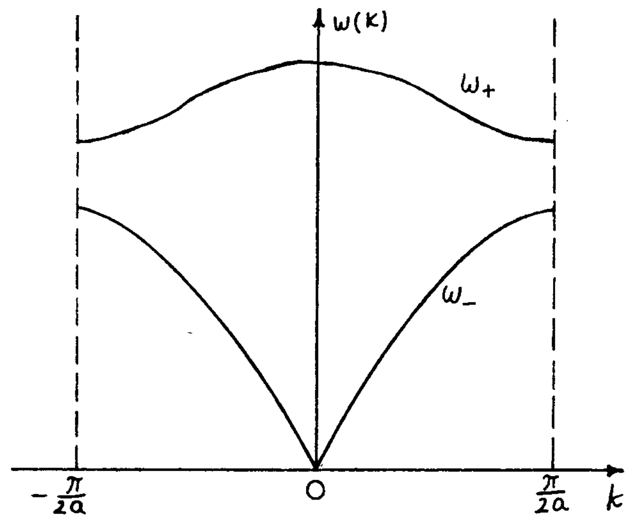
$$M_1\ddot{u}_{2n} = C(u_{2n+1} + u_{2n-1} - 2u_{2n})$$

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

Da bi se dobila netrivijalna rešenja determinanta ovog sistema mora biti jednaka nuli. Rešavanjem se za ω dobijaju dve vrste frekvencija:

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

Grafička zavisnost ova dva korena je :



Sa grafika se vidi da fononski spektar ima dve grane: akustičku ($\lim_{k\to 0}\omega_- = 0$) i optičku ($\lim_{k\to 0}\omega_+ = \omega_o$) koja poseduje energetski gep $\omega_0 = \sqrt{2C(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2})}$.

2.3 Fononska stanja i zakon disperzije

Potpuna analogija važi i za trodimenzionalnu rešetku. Ako se posmatra prosta kubna rešetka $a_x = a_y = a_z = a$ i pod pretpostavkom da su torzione konstante $C_{\alpha,\beta}(\alpha \neq \beta)$ zanemarive u odnosu na konstante istezanja $C_{\alpha,\alpha}$, iz uslova netrivijalnosti rešenja:

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

dobija se zakon disperzije fonona:

$$\omega_i(\vec{n}) = 2\varepsilon\sqrt{\sin^2\frac{ka_x}{2} + \sin^2\frac{ka_y}{2} + \sin^2\frac{ka_z}{2}} \, . \qquad (2.26)$$

gde je $\varepsilon = \hbar\sqrt{\frac{C}{M}} \simeq \frac{\hbar v}{a}$, v - je usrednjena brzina zvuka, C - usrednjena Hukova konstanta, tj.

$$v = \frac{1}{3}\sum_{\alpha} v_{\alpha} \, ; \quad C = \frac{1}{3}\sum_{\alpha} C_{\alpha,\alpha} \, .$$

U kristalima sa prostom elementarnom ćelijom, sve tri komponente frekvencija zvučnih talasa $\omega_\alpha(k)$ teže ka nuli kada $k \rightarrow 0$. Takvi kvanti mehaničkih pobudjenja sa linearnim zakonom disperzije zovu se - **akustičkim fononima**.

Ako se na sličan način analizira kristal složene strukture sa šest podrešetki, onda se za dozvoljene frekvencije dobija 3σ rešenja, od kojih tri frekvencije uvek teže nuli kada $k \rightarrow 0$ i odgovaraju akustičkim fononskim granama, dok za ostale $(3\sigma - 3)$ grane važi $\lim_{k\rightarrow 0} \omega(k) \neq 0$ a mehaničke oscilacije sa ovom osobinom zovu se - **optičkim fononima**.

Hamiltonijan, oblika (2.18), klasično tretira ponašanje sistema. Kako je hamiltonijan kvadratni može se dijagonalizovati Furijeovom transformacijom (2.21), tj. nalaženjem rešenja u obliku ravnih talasa. Prelazak na kvantnomehanički opis koristi isti oblik hamiltonijana, samo se u izrazu (2.21) prelazi na operatore $u_{\vec{n}} \rightarrow \hat{u}_{\vec{n}}$ a koeficijenti razvoja su Boze - operatori $b_j^+(\vec{k})$ i $b_j(\vec{k})$ koji kreiraju odnosno anihiliraju fonone sa energijom $\hbar\omega_j(\vec{k})$. Novi operatori zadovoljavaju sledeće komutacione relacije:

$$\left[b_i(\vec{k}), b_j^+(\vec{l})\right] = \delta_{\vec{k},\vec{l}}\delta_{i,j} .$$

Na taj način se prelazi iz konfiguracionog u impulsni prostor i vrši druga kvantizacija.

Kvantnomehanički hamiltonijan, oblika (2.18), može se unitarnom transformacijom svesti na hamiltonijan nezavisnih oscilatora, tj. dijagonalizovati (i naći energija fonona u idealnoj beskonačnoj strukturi). Ona se sastoji u razvoju pomeraja u_n po ravnim talasima oblika:

$$\vec{u}(\vec{k}) = \sum_{\vec{k},j} \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_j(\vec{k})}} \left[b_{\vec{k},j}^+ e^{-i(\vec{k}\vec{n}-\omega_j(\vec{k})t)} + b_{\vec{k},j} e^{i(\vec{k}\vec{n}-\omega_j(\vec{k})t)}\right] \vec{e}_j(\vec{k}) \; ; \qquad j \in (x, y, z) \tag{2.27}$$

gde je $N = N_x N_y N_z$ broj atoma u elementarnoj ćeliji, $\vec{e}_j(\vec{k})$ su polarizacioni fononski ortovi:

$$\vec{e}_i(\vec{k})\vec{e}_j(\vec{k}) = \delta_{i,j} \; ; \qquad i, j \in (x, y, z) .$$

Na taj način hamiltonijan sistema je dijagonalnog oblika:

$$H = \sum_{\vec{k},j} \left[b_j^+(\vec{k}) b_j(\vec{k}) + \frac{1}{2}\right] \hbar\omega_j(\vec{k}) \tag{2.28}$$

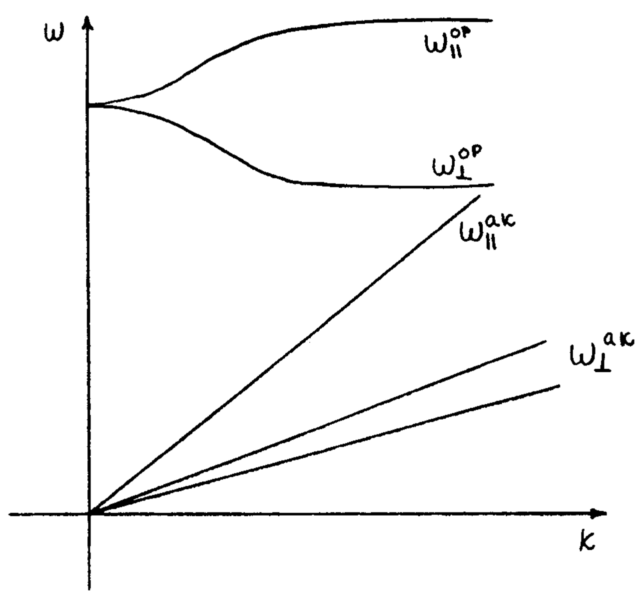
Kod niza sa tri stepena slobode pogodno je razmatrati tri načina oscilovanja: jedno duž pravca niza i dva uzajamno normalna u ravnima, normalnim na osu niza. Sa tri stepena slobode javlja se mogućnost rasprostiranja dva vida talasa: longitudinalni i transverzalni. To sledi iz uslova normiranja. Kod longitudinalnih talasa vektor pomeraja atoma $\vec{u}(\vec{k})$ usmeren je duž lanca i podudara se sa pravcem prostiranja talasa $\vec{e}_1 \parallel \vec{k}$.

Kod transverzalnih talasa, vektor polarizacije $\vec{e}_2$ usmeren je normalno osi lanca i normalan je na talasni vektor $\vec{k}$, $\vec{e}_2 \perp \vec{k}$. Za male vrednosti $\vec{k}$ zakoni disperzije longitudinalnih i transverzalnih talasa imaju isti oblik:

$$\omega_{\parallel} = \omega_{\parallel} k \; ; \quad \omega_{\perp} = \omega_{\perp} k$$

S obzirom da su oscilacije lanca u ravni normalnoj na osu lanca izotropne, $v_{\perp}$ ne zavisi od pravca vektora polarizacije u transverzalnom talasu. Zbog toga se zakon disperzije u trodimenzionalnom slučaju podudara sa zakonom disperzije u dvodimenzionalnom slučaju, tj. grana $\omega_{\perp}(k)$ je dvostruko degenerisana.

Fononski spektar trodimenzionalnog kristala se sastoji od dve grane: longitudinalne $\omega_{\parallel}^{ak}(\vec{k})$ i dve transverzalne $\omega_{\perp}^{ak}(k)$ akustičke grane i dve grane optičkih fonona, takodje longitudinalne $\omega_{\parallel}^{op}(\vec{k})$ i transverzalne $\omega_{\perp}^{op}(k)$. Pri tome su grane $\omega_{\perp}^{op}$ i $\omega_{\perp}^{ak}$ dvostruko degenerisane. Ako u sistemu postoji N fonona, tada imamo $3N$ grana, od toga su 3 akustičke grane i $3N-3$ grana optičkih fonona.



3. FONONI U FILM-STRUKTURAMA

Osnovni cilj je da se ispitaju karakteristike idealnih film - struktura. S obzirom da su fononi osnovna pobudjenja u kristalima, zanimljivo je izučiti uticaj takve strukture na osobine ovih sistema. Ispitivanje se vrši u onom domenu u kojem to omogućuje matematički formalizam, uz korišćenje takvih aproksimacija bez kojih bi analiza bila nemoguća.

Posmatrajmo tanki film "istrgnut" iz izotropne kubne idealne kristalne strukture sa konstantom rešetke $a_x = a_y = a_z = a$ (elementarna ćelija ima sve tri jednake stranice). Takodje, film ima konačnu debljinu u Z - pravcu, dok su XY ravni beskonačne, što znači da posmatrana struktura poseduje dve beskonačne granične površine paralelne XY ravnima i to za $z = 0$ i $z = L$.

Hamiltonijan fononskog podsistema opisanog idealnog filma u aproksimaciji najbližih suseda dat je u obliku:

$$H_{if} = \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}} \frac{p_{\vec{n}}^2}{M} + \frac{1}{4}\sum_{\vec{n},\vec{\lambda}} C_{\vec{n},\vec{\lambda}}(\vec{u}_{\vec{n}} - \vec{u}_{\vec{n}+\vec{\lambda}})^2 \tag{3.1}$$

S obzirom na opisani model: $\vec{n} = a\sum_\alpha n_\alpha \vec{e}_\alpha$, $\vec{\lambda} = a\vec{e}_\alpha$, $\alpha = (x,y,z)$; $-\frac{N_\beta}{2} \leq n_\beta \leq \frac{N_\beta}{2}$, $N_z N_\beta \sim 10^8$, $\beta = (x,y)$; $0 \leq n_z \leq N_z$, $N_z = \frac{L}{a}$, hamiltonijan (3.1) mora se napisati u razvijenoj formi:

$$H_{if} = \frac{1}{2M}\sum_{\alpha,n_x,n_y,n_z} p^2_{n_x,n_y,n_z} + \frac{1}{4}\sum_{\alpha}\sum_{n_x,n_y}\Big\{C_{\alpha\alpha,-1}u^2_{\alpha,n_x,n_y,0} + C_{\alpha\alpha,0}$$

$$\times\Big[(u_{\alpha;n_x+1,n_y,0} - u_{\alpha;n_x,n_y,0})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,n_y,0} - u_{\alpha;n_x,n_y,0})^2 + (u_{\alpha;n_x,n_y+1,1} - u_{\alpha;n_x,n_y,0})^2 +$$

$$+(u_{\alpha;n_x,n_y-1,0} - u_{\alpha;n_x,n_y,0})^2 + (u_{\alpha;n_x,n_y,1} - u_{\alpha;n_x,n_y,0})^2 + u^2_{\alpha;n_x,n_y,0}\Big] +$$

$$+\sum_{n_z=1}^{N_z-1} C_{\alpha\alpha;n_z}\Big[(u_{\alpha;n_x+1,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,n_z})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,n_z})^2 +$$

$$+(u_{\alpha;n_x,n_y+1,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,n_z})^2 + (u_{\alpha;n_x,n_y-1,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,n_z})^2]+$$

$$+\sum_{n_z=2}^{N_z-2} C_{\alpha\alpha,n_z}[(u_{\alpha;n_x,n_y,n_z+1} - u_{\alpha;n_x,n_y,n_z})^2 + (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z-1} - u_{\alpha;n_x,n_y,n_z})^2]+$$

$$+C_{\alpha\alpha,N_z}[(u_{\alpha;n_x+1,n_y,N_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,N_z})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,n_y,N_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,N_z})^2+$$

$$+(u_{\alpha;n_x,n_y+1,N_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,N_z})^2 + (u_{\alpha;n_x,n_y-1,N_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,N_z})^2+$$

$$+(u_{\alpha,n_x,n_y,N_z-1} - u_{\alpha,n_x,n_y,N_z})^2 + u^2_{\alpha,n_x,n_y,N_z}]+$$

$$+C_{\alpha\alpha,N_z-1}[(u_{\alpha n_x,n_y,N_z-1} - u_{n_x,n_y,N_z})^2 + (u_{\alpha,n_x,n_y,N_z-1} - u_{\alpha,n_x,n_y,N_z-2})^2]+$$

$$+C_{\alpha\alpha,1}[(u_{n_x,n_y,1} - u_{n_x,n_y,2})^2 + (u_{n_x,n_y,1} - u_{n_x,n_y,o})^2] + C_{\alpha\alpha,N_z+1}u^2_{\alpha,n_x,n_y,N_z}\}$$

Ovaj hamiltonijan možemo razdvojiti na hamiltonijan po površini H_p i po zapremini H_z, tj.

$$H_{if} = H_p + H_z \tag{3.2}$$

uz uslov $C_{\alpha\alpha,i} = C_{\alpha\alpha}$, $i = -1, 0, 1, n_z, N_z, N_z-1, N_z+1$. Kako su slojevi $n_z = -1$ i $n_z = N_z + 1$ odsutni, moramo uzeti sledeće:

$$u_{\alpha,n_x,n_y,-1} = u_{\alpha,n_x,n_y,N_z+1} = 0 \; ; \quad C_{\alpha\alpha,-1} = C_{\alpha\alpha,N_z+1} \neq 0$$

Kad bi $C_{\alpha\alpha,-1} = C_{\alpha\alpha,N_z+1} = 0$, tada bi granični atomi za $n_z = 0$ i $n_z = N_z$ bili "zamrznuti". Na taj način dobijamo:

$$H_p = \frac{1}{2M}\sum_{\alpha}\sum_{n_x,n_y}[p^2_{\alpha,n_x,n_y,o} + p^2_{\alpha,n_x,n_y,N_z}] + \frac{1}{4}\sum_{\alpha} C_{\alpha\alpha}\sum_{N_x,n_y}$$

$$\times\left\{2u^2_{\alpha,n_x,n_y,o} + 2u^2_{\alpha,n_x,n_y,N_z} + 2(u_{\alpha n_x,n_y,N_z-1} - u_{n_x,n_y,N_z})^2 2(u_{\alpha,n_x,n_y,1} - u_{\alpha,n_x,n_y,o})^2 +\right.$$

$$+(u_{\alpha,n_x,n_y,o} - u_{\alpha,n_x+1,n_y,o})^2 + (u_{\alpha,n_x,n_y,o} - u_{\alpha,n_x-1,n_y,o})^2 + (u_{\alpha,n_x,n_y,o} - u_{\alpha,n_x,n_y+1,o})^2+$$

$$+(u_{\alpha,n_x,n_y,o}-u_{\alpha,n_x,n_y-1,o})^2+(u_{\alpha,n_x,n_y,N_z}-u_{\alpha,n_x+1,n_y,N_z})^2+(u_{\alpha,n_x,n_y,N_z}-u_{\alpha,n_x-1,n_y,N_z})^2+$$

$$\left.+(u_{\alpha,n_x,n_y,N_z} - u_{\alpha,n_x,n_y+1,N_z})^2 + (u_{\alpha,n_x,n_y,N_z} - u_{\alpha,n_x,n_y-1,N_z})^2\right\} \tag{3.3}$$

$$H_z = \frac{1}{2M}\sum_{\alpha}\sum_{n_x,n_y} p^2_{\alpha,n_x,n_y,n_z} + \sum_{\alpha}\frac{C_{\alpha\alpha}}{4}\times$$

$$\times\sum_{n_x,n_y}\Bigg\{\sum_{n_z=1}^{N_z-1}[(u_{\alpha,n_x+1,n_y,n_z} - u_{\alpha,n_x,n_y,n_z})^2 + (u_{\alpha,n_x-1,n_y,n_z} - u_{\alpha,n_x,n_y,n_z})^2 +$$

$$+ (u_{\alpha,n_x,n_y+1,n_z} - u_{\alpha,n_x,n_y,n_z})^2 + (u_{\alpha,n_x,n_y-1,n_z} - u_{\alpha,n_x,n_y,n_z})^2] + \tag{3.4}$$

$$+ \sum_{n_z=2}^{N_z-2}[(u_{\alpha,n_x,n_y,n_z+1} - u_{\alpha,n_x,n_y,n_z})^2 + (u_{\alpha,n_x,n_y,n_z-1} - u_{\alpha,n_x,n_y,n_z})^2] +$$

$$+ (u_{\alpha,n_x,n_y,N_z-1} - u_{\alpha,n_x,n_y,N_z-2})^2 + (u_{\alpha,n_x,n_y,1} - u_{\alpha,n_x,n_y,2})^2\Bigg\}$$

Da bi smo rešili svojstveni problem hamiltonijana (3.2) formiraćemo jednačine kretanja za operatore u i p:

$$i\hbar\dot{u}^{\beta}_{\vec{m}} = [u^{\beta}_{\vec{m}}, H_{if}]\ ; \quad i\hbar\dot{p}^{\beta}_{\vec{m}} = [p^{\beta}_{\vec{m}}, H_{if}]\ ; \quad \vec{m} \in (m_x, m_y, m_z)\ . \tag{3.5}$$

Uzamajući u obzir komutacione relacije za operatore pomeraja u i impulsa p:

$$[u^{\alpha}_{\vec{n}}, p^{\beta}_{\vec{m}}] = i\hbar\delta_{\vec{n},\vec{m}}\delta_{\vec{\alpha},beta}\ ; \quad [u^{\alpha}_{\vec{n}}, u^{\beta}_{\vec{m}}] = [p^{\alpha}_{\vec{n}}, p^{\beta}_{\vec{m}}] = 0\ ,$$

možemo izračunati odgovarajuće komutatore iz (3.5) i ove dve jednačine spojiti u jednu, koja sadrži samo pomeraje u.

Na taj način dobijamo sledeći sistem jednačina za $n_z = 0$:

$$[u_{\beta,m_x,m_y,o}, H_{if}] = [u_{\beta,m_x,m_y,o}, H_p] = \frac{1}{2M}\sum_{\alpha}\sum_{n_x,n_y}[u_{\beta,m_x,m_y,o}, p^2_{\alpha,n_x,n_y,o}] =$$

$$= \frac{1}{M}\sum_{\alpha}\sum_{n_x,n_y}[u^{\beta}_{\beta,m_x,m_y,o}, p_{\alpha,n_x,n_y,o}]p_{\alpha,n_x,n_y,o} =$$

$$= \frac{1}{M}\sum_{\alpha}\sum_{n_x,n_y} i\hbar\delta_{\alpha,\beta}\delta_{n_x,m_x}\delta_{n_y,m_y}p_{\alpha,n_x,n_y,o} = \frac{i\hbar}{M}p_{\beta,m_x,m_y,o}$$

$$\dot{u}_{\beta,m_x,m_y,o} = \frac{1}{M}p_{\beta,m_x,m_y,o}$$

Diferenciranjem ovog izraza po t i na osnovu (3.5) sledi da je:

$$\ddot{u}_{\beta,m_x,m_y,o} = \frac{\dot{p}_{\beta,m_x,m_y,o}}{M} = [p_{\beta;m_x,m_y,n_z}, H_{if}] \tag{3.6}$$

Kako je:

$$[p_{\beta,m_x,m_y,o}, H_{if}] = [p_{\beta,m_x,m_y,o}, H_p] = \sum_\alpha \frac{C_{\alpha\alpha}}{4} \times$$

$$\times \sum_{n_x,n_y} \Big\{ 8u_{\alpha,n_x,n_y,o}[p_{\beta,m_x,m_y,o}, u_{\alpha,n_x,n_y,o}] - 4u_{\alpha,n_x,n_y,1}[p_{\beta,m_x,m_y,o}, u_{\alpha,n_x,n_y,o}] +$$

$$+2(u_{\alpha,n_x,n_y,o} - u_{\alpha,n_x+1,n_y,o})[p_{\beta,m_x,m_y,o}, (u_{\alpha,n_x,n_y,o} - u_{\alpha,n_x+1,n_y,o})] +$$

$$+2(u_{\alpha,n_x,n_y,o} - u_{\alpha,n_x-1,n_y,o})[p_{\beta,m_x,m_y,o}, (u_{\alpha,n_x,n_y,o} - u_{\alpha,n_x-1,n_y,o})] +$$

$$+2(u_{\alpha,n_x,n_y,o} - u_{\alpha,n_x,n_y+1,o})[p_{\beta,m_x,m_y,o}, (u_{\alpha,n_x,n_y,o} - u_{\alpha,n_x,n_y+1,o})] +$$

$$+2(u_{\alpha,n_x,n_y,o} - u_{\alpha,n_x,n_y-1,o})\,[p_{\beta,m_x,m_y,o}, (u_{\alpha,n_x,n_y,o} - u_{\alpha,n_x,n_y-1,o})] \Big\} =$$

$$= \sum_\alpha \frac{C_{\alpha\alpha}}{2} \sum_{n_x,n_y} \Big\{ 2(2u_{\alpha,n_x,ny,o} - u_{\alpha,n_x,n_y,1})(-i\hbar\delta_{n_x,m_x}\delta_{n_y,m_y}\delta_{\alpha,\beta}) +$$

$$+(u_{\alpha,n_x,n_y,o} - u_{\alpha,n_x+1,n_y,o})(-i\hbar\delta_{n_x,m_x}\delta_{n_y,m_y}\delta_{\alpha,\beta} + i\hbar\delta_{n_x+1,m_x}\delta_{n_y,m_y}\delta_{\alpha,\beta}) +$$

$$+(u_{\alpha,n_x,n_y,o} - u_{\alpha,n_x-1,n_y,o})(-i\hbar\delta_{n_x,m_x}\delta_{n_y,m_y}\delta_{\alpha,\beta} + i\hbar\delta_{n_x-1,m_x}\delta_{n_y,m_y}\delta_{\alpha,\beta}) +$$

$$+(u_{\alpha,n_x,n_y,o} - u_{\alpha,n_x,n_y+1,o})(-i\hbar\delta_{n_x,m_x}\delta_{n_y,m_y}\delta_{\alpha,\beta} + i\hbar\delta_{n_x,m_x}\delta_{n_y+1,m_y}\delta_{\alpha,\beta}) \Big\} =$$

$$= -i\hbar\frac{C_{\beta\beta}}{2} \Big\{ 2(2u_{\beta,m_x,m_y,o} - u_{\beta,m_x,m_y,1}) + u_{\beta,m_x,m_y,o} - u_{\beta,m_x-1,m_y,o} +$$

$$+u_{\beta,m_x-1,m_y,o} - u_{\beta,m_x,m_y,o} + u_{\beta,m_x,m_y,o} - u_{\beta,m_x,m_y+1,o} + u_{\beta,m_x,m_y-1,o} -$$

$$-u_{\beta,m_x,m_y,o} + u_{\beta,m_x,m_y,o} - u_{\beta,m_x-1,m_y,o} + u_{\beta,m_x,m_y+1,o} - u_{\beta,m_x,m_y,o} \Big\} =$$

$$= i\hbar C_{\beta\beta}\left\{6u_{\beta,m_x,m_y,o} - u_{\beta,m_x,m_y,1} - u_{\beta,m_x-1,m_y,o} -\right.$$

$$\left. -u_{\beta,m_x+1,m_y,o} - u_{\beta,m_x,m_y+1,o} - u_{\beta,m_x,m_y-1,o}\right\}$$

Zamenom ovog izraza u drugu od jednačina (3.5) sledi:

$$\dot{p}_{\beta,m_x,m_y,o} = C_{\beta\beta}\left\{6u_{\beta,m_x,m_y,o} - u_{\beta,m_x,m_y,1} - u_{\beta,m_x-1,m_y,o} -\right.$$

$$\left. -u_{\beta,m_x+1,m_y,o} - u_{\beta,m_x,m_y+1,o} - u_{\beta,m_x,m_y-1,o}\right\}$$

Ako obeležimo $\frac{C_{\beta\beta}}{M} = \Omega^2_{\beta\beta}$ i uzmemo $\vec{m} \to \vec{n}$, $\beta \to \alpha$ zamenom ovog rezultata u (3.6) dobijamo sistem jednačina:

$$\ddot{u}_{\alpha,n_x,n_y,o} - \Omega^2_{\alpha\alpha}\left\{u_{\alpha,n_x+1,n_y,o} + u_{\alpha,n_x-1,n_y,o} - 2u_{\alpha,n_x,n_y,o} + u_{\alpha,n_x,n_y+1,o} +\right.$$

$$\left. +u_{\alpha,n_x,n_y-1,o} - 2u_{\alpha,n_x,n_y,o} + u_{\alpha,n_x,n_y,1} - 2u_{\alpha,n_x,n_y,o}\right\} = 0 \qquad (3.7)$$

Za $1 \leq n_z \leq N_z + 1$ na isti način dobijamo:

$$i\hbar\dot{u}_{\beta,m_x,m_y,m_z} = [u_{\beta,m_x,m_y,m_z}, H_{if}] = [u_{\beta,m_x,m_y,m_z}, \tilde{H}_z] =$$

$$= \frac{1}{M}\sum_{\alpha}\sum_{n_x,n_y}\sum_{n_z=1}^{N_z-1}[u_{\beta,m_x,m_y,m_z}, p_{\alpha,n_x,n_y,n_z}]p_{\alpha,n_x,n_y,n_z} =$$

$$= \frac{1}{M}\sum_{\alpha}\sum_{n_x,n_y}\sum_{n_z=1}^{N_z-1}\delta_{\alpha\beta}\delta_{n_x,m_x}\delta_{n_y,m_y}\delta_{n_z,m_z}p_{\alpha,n_x,n_y,n_z} = \frac{i\hbar}{M}p_{\beta,m_x,m_y,m_z};$$

$$\tilde{H}_z = \frac{1}{2M}\sum_{\alpha}\sum_{n_x,n_y}\sum_{n_z=1}^{N_z-1}p^2_{\alpha,n_x,n_y,n_z} + \sum_{\alpha}\frac{C_{\alpha\alpha}}{4}\sum_{n_x,n_y}\sum_{n_z=1}^{N_z-1}\left\{(u_{\alpha,n_x+1,n_y,n_z} - u_{\alpha,n_x,n_y,n_z})^2 +\right.$$

$$+(u_{\alpha,n_x-1,n_y,n_z} - u_{\alpha,n_x,n_y,n_z})^2 + (u_{\alpha,n_x,n_y+1,n_z} - u_{\alpha,n_x,n_y,n_z})^2 + (u_{\alpha,n_x,n_y-1,n_z} - u_{\alpha,n_x,n_y,n_z})^2$$

$$\left. +(u_{\alpha,n_x,n_y,n_z+1} - u_{\alpha,n_x,n_y,n_z})^2 + (u_{\alpha,n_x,n_y,n_z-1} - u_{\alpha,n_x,n_y,n_z})^2\right\}$$

$$i\hbar\dot{p}_{\beta,m_x,m_y,m_z} = [p_{\beta,m_x,m_y,m_z}, H_{if}] = [p_{\beta,m_x,m_y,m_z}, \tilde{H}_z] = \sum_{\alpha} \frac{C_{\alpha\alpha}}{4} \sum_{n_x,n_y} \sum_{n_z=1}^{N_z-1} \times$$

$$\Big\{2[p_{\beta,m_x,m_y,m_z}, (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x+1,n_y,n_z})](u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x+1,n_y,n_z})+$$

$$+2[p_{\beta,m_x,m_y,m_z}, (u_{\alpha;n_x-1,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,n_z})](u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x-1,n_y,n_z})+$$

$$+2[p_{\beta,m_x,m_y,m_z}, (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y+1,n_z})](u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y+1,n_z})+$$

$$+2[p_{\beta,m_x,m_y,m_z}, (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y-1,n_z})](u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y-1,n_z})+$$

$$+2[p_{\beta,m_x,m_y,m_z}, (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,n_z+1})](u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,n_z+1})+$$

$$+2[p_{\beta,m_x,m_y,m_z}, (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,n_z-1})](u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,n_z-1})\Big\} =$$

$$= \sum_{\alpha} \frac{C_{\alpha\alpha}}{2} \sum_{n_x,n_y} \sum_{n_z=1}^{N_z-1} \delta_{\alpha\beta}(-i\hbar)\Big\{(\delta_{\vec{n}\vec{m}} - \delta_{n_x+1,m_x}\delta_{n_y,m_y}\delta_{n_z,m_z})\times$$

$$\times(u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha,n_x+1,n_y,n_z}) + (\delta_{\vec{n}\vec{m}} - \delta_{n_x-1,m_x}\delta_{n_y,m_y}\delta_{n_z,m_z})(u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x+1,n_y,n_z})+$$

$$+(\delta_{\vec{n}\vec{m}} - \delta_{n_x,m_x}\delta_{n_y+1,m_y}\delta_{n_z,m_z})(u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y+1,n_z}) + (\delta_{\vec{n}\vec{m}} - \delta_{n_x,m_x}\delta_{n_y-1,m_y}\delta_{n_z,m_z})\times$$

$$\times(u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y-1,n_z}) + (\delta_{\vec{n}\vec{m}} - \delta_{n_x,m_x}\delta_{n_y,m_y}\delta_{n_z+1,m_z})(u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,n_z+1})+$$

$$+(\delta_{\vec{n}\vec{m}} - \delta_{n_x,m_x}\delta_{n_y,m_y}\delta_{n_z-1,m_z})(u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,n_z-1})\Big\} =$$

$$= -i\hbar\frac{C_{\beta\beta}}{2}\Big\{u_{\beta,m_x,m_y,m_z} - u_{\beta,m_x+1,m_y,m_z} - u_{\beta,m_x-1,m_y,m_z} + u_{\beta,m_x,m_y,m_z} +$$

$$+u_{\beta,m_x,m_y,m_z} - u_{\beta,m_x-1,m_y,m_z} - u_{\beta,m_x+1,m_y,m_z} + u_{\beta,m_x,m_y,m_z} + u_{\beta,m_x,m_y,m_z} -$$

$$-u_{\beta,m_x,m_y+1,m_z} - u_{\beta,m_x,m_y-1,m_z} + u_{\beta,m_x,m_y,m_z} + u_{\beta,m_x,m_y,m_z} - u_{\beta,m_x,m_y+1,m_z} -$$

$$-u_{\beta,m_x,m_y-1,m_z} + u_{\beta,m_x,m_y,m_z} + u_{\beta,m_x,m_y,m_z} - u_{\beta,m_x,m,m_z+1} - u_{\beta,m_x,m_y,m_z-1} +$$

$$+u_{\beta,m_x,m_y,m_z} + u_{\beta,m_x,m_y,m_z} - u_{\beta,m_x,m,m_z+1} - u_{\beta,m_x,m_y,m_z-1} + u_{\beta,m_x,m_y,m_z}\Big\} =$$

$$= -i\hbar C_{\beta\beta}\Big\{6u_{\beta,m_x,m_y,m_z} - u_{\beta,m_x+1,m_y,m_z} - u_{\beta,m_x-1,m_y,m_z} -$$

$$-u_{\beta,m_x,m_y+1,m_z} - u_{\beta,m_x,m_y-1,m_z} - u_{\beta,m_x,m_y,m_z+1} - u_{\beta,m_x,m_y,m_z-1}\Big\} \ ;$$

$$\ddot{u}_{\beta,m_x,m_y,m_z} = \frac{\dot{p}_{m_x,m_y,m_z}}{M} = -\frac{C_{\beta\beta}}{M}\Big\{6u_{\beta,m_x,m_y,m_z} - u_{\beta,m_x+1,m_y,m_z} - u_{\beta,m_x-1,m_y,m_z} -$$

$$-u_{\beta,m_x,m_y+1,m_z} - u_{\beta,m_x,m_y-1,m_z} - u_{\beta,m_x,m_y,m_z+1} - u_{\beta,m_x,m_y,m_z-1}\Big\} \ ;$$

odnosno:

$$\ddot{u}_{\alpha,n_x,n_y,n_z} - \Omega^2_{\alpha\alpha}\Big\{u_{\alpha,n_x+1,n_y,n_z} + u_{\alpha,n_x-1,n_y,n_z} - 2u_{\alpha,n_x,n_y,n_z} + u_{\alpha,n_x,n_y+1,n_z} +$$

$$+u_{\alpha,n_x,n_y-1,n_z} - 2u_{\alpha,n_x,n_y,n_z} + u_{\alpha,n_x,n_y,n_z+1} - u_{\alpha,n_x,n_y,n_z-1} - 2u_{\alpha,n_x,n_y,n_z}\Big\} = 0 \quad (3.8)$$

Konačno za $n_z = N_z$ potpuno istim postupkom sledi:

$$i\hbar\dot{u}_{\beta,m_x,m_y,N_z} = [u_{\beta,m_x,m_y,N_z}, H_{if}] = [u_{\beta,m_x,m_y,N_z}, H_p] =$$

$$= \frac{1}{M}\sum_{\alpha}\sum_{n_x,n_y}[u_{\beta,m_x,m_y,N_z}, p_{\alpha,n_x,n_y,N_z}]p_{\alpha,n_x,n_y,N_z} =$$

$$= \frac{1}{M} \sum_{\alpha} \sum_{n_x,n_y} i\hbar \delta_{\alpha,\beta} \delta_{n_x,m_x} \delta_{n_y,m_y} p_{\alpha,n_x,n_y,N_z} = \frac{i\hbar}{M} p_{\beta,m_x,m_y,N_z} \; ;$$

$$i\hbar \dot{p}_{\beta;m_x,m_y,m_z} = [p_{\beta,m_x,m_y,N_z}, H_{if}] = [p_{\beta,m_x,m_y,N_z}, H_p] = \sum_{\alpha} \frac{C_{\alpha\alpha}}{4} \sum_{n_x,n_y} \times$$

$$\Big\{ 4[p_{\beta,m_x,m_y,N_z}, u_{\alpha,n_x,n_y,N_z}] u_{\alpha,n_x,n_y,N_z} + 2[p_{\beta,m_x,m_y,N_z}, (u_{\alpha,n_x,n_y,N_z} - u_{\alpha,n_x+1,n_y,N_z})] \times$$

$$\times (u_{\alpha,n_x,n_y,N_z} - u_{\alpha,n_x+1,n_y,N_z}) + 2[p_{\beta,m_x,m_y,N_z}, (u_{\alpha,n_x,n_y,N_z} - u_{\alpha,n_x-1,n_y,N_z})] \times$$

$$\times (u_{\alpha,n_x,n_y,N_z} - u_{\alpha,n_x-1,n_y,N_z}) + 2[p_{\beta,m_x,m_y,N_z}, (u_{\alpha,n_x,n_y,N_z} - u_{\alpha,n_x,n_y+1,N_z})] \times$$

$$\times (u_{\alpha,n_x,n_y,N_z} - u_{\alpha,n_x,n_y+1,N_z}) + 2[p_{\beta,m_x,m_y,N_z}, (u_{\alpha,n_x,n_y,N_z} - u_{\alpha,n_x,n_y-1,N_z})] \times$$

$$\times (u_{\alpha,n_x,n_y,N_z} - u_{\alpha,n_x,n_y-1,N_z}) + 4[p_{\beta,m_x,m_y,N_z}, (u_{\alpha,n_x,n_y,N_z} - u_{\alpha,n_x,n_y,N_z-1})] \times$$

$$\times (u_{\alpha,n_x,n_y,N_z} - u_{\alpha,n_x,n_y,N_z-1}) \Big\} = \sum_{\alpha} \frac{C_{\alpha\alpha}}{2} \sum_{n_x,n_y} \Big\{ 2u_{\alpha,n_x,n_y,N_z} (-i\hbar \delta_{n_x,m_x} \delta_{n_y,m_y} \delta_{\alpha\beta}) +$$

$$+ (u_{\alpha,n_x,n_y,N_z} - u_{\alpha,n_x+1,n_y,N_z})(-i\hbar \delta_{n_x,m_x} \delta_{n_y,m_y} \delta_{\alpha\beta} + i\hbar \delta_{n_x+1,m_x} \delta_{n_y,m_y} \delta_{\alpha\beta}) +$$

$$+ (u_{\alpha,n_x,n_y,N_z} - u_{\alpha,n_x-1,n_y,N_z})(-i\hbar \delta_{n_x,m_x} \delta_{n_y,m_y} \delta_{\alpha\beta} + i\hbar \delta_{n_x-1,m_x} \delta_{n_y,m_y} \delta_{\alpha\beta}) +$$

$$+ (u_{\alpha,n_x,n_y,N_z} - u_{\alpha,n_x,n_y+1,N_z})(-i\hbar \delta_{n_x,m_x} \delta_{n_y,m_y} \delta_{\alpha\beta} + i\hbar \delta_{n_x,m_x} \delta_{n_y+1,m_y} \delta_{\alpha\beta}) +$$

$$+ (u_{\alpha,n_x,n_y,N_z} - u_{\alpha,n_x,n_y-1,N_z})(-i\hbar \delta_{n_x,m_x} \delta_{n_y,m_y} \delta_{\alpha\beta} + i\hbar \delta_{n_x,m_x} \delta_{n_y-1,m_y} \delta_{\alpha\beta}) +$$

$$+ 2(u_{\alpha,n_x,n_y,N_z} - u_{\alpha,n_x,n_y,N_z-1})(-i\hbar \delta_{n_x,m_x} \delta_{n_y,m_y} \delta_{\alpha\beta} + i\hbar \delta_{n_x,m_x} \delta_{n_y,m_y} \delta_{N_z,N_z-1} \delta_{\alpha\beta}) \Big\} =$$

$$= -i\hbar C_{\beta\beta}\left\{6u_{\beta,m_x,m_y,N_z} - u_{\beta,m_x-1,m_y,N_z} - u_{\beta,m_x+1,m_y,N_z} - \right.$$

$$\left. - u_{\beta,m_x,m_y-1,N_z} - u_{\beta,m_x,m_y+1,N_z} - u_{\beta,m_x,m_y,N_z-1}\right\} ;$$

$$\ddot{u}_{\beta,m_x,m_y,N_z} = \frac{\dot{p}_{\beta,m_x,m_y,N_z}}{M} = -\frac{C_{\beta\beta}}{M}\left\{6u_{\beta,m_x,m_y,N_z} - u_{\beta,m_x-1,m_y,N_z} - u_{\beta,m_x+1,m_y,N_z} - \right.$$

$$\left. - u_{\beta,m_x,m_y-1,N_z} - u_{\beta,m_x,m_y+1,N_z} - u_{\beta,m_x,m_y,N_z-1}\right\} ;$$

odnosno:

$$\ddot{u}_{\alpha,n_x,n_y,N_z} - \Omega^2_{\alpha\alpha}\left\{u_{\alpha,n_x+1,n_y,N_z} + u_{\alpha,n_x-1,n_y,N_z} - 2u_{\alpha,n_x,n_y,N_z} + u_{\alpha,n_x,n_y+1,N_z} + \right.$$

$$\left. + u_{\alpha,n_x,n_y-1,N_z} - 2u_{\alpha,n_x,n_y,N_z} + u_{\alpha,n_x,n_y,N_z-1} - 2u_{\alpha,n_x,n_y,n_z}\right\} = 0 \qquad (3.9)$$

Rešenje sistema jednačina (3.7), (3.8) i (3.9) za atomske pomeraje moramo tražiti u obliku superpozicije proizvoda nepoznate funkcije (duž z - ose) i harmonijske funkcije položaja (u XY ravnima), tj.

$$u_{\alpha,\vec{n}}(t) = \sum_{k_x,k_y}\sum_{k_z} A_{\alpha,n_z}(k_z)\left\{b_{\alpha,k_x,k_y,k_z}e^{ia(k_xn_x+k_yn_y)-it\omega_{\alpha,\vec{k}}} + \right.$$

$$\left. + b^+_{\alpha,k_x,k_y,k_z}e^{-ia(k_xn_x+k_yn_y)+it\omega_{\alpha,\vec{k}}}\right\} , \qquad (3.10)$$

gde su A za sada neodredjene amplitude, b, i b^+ fononski anihilacioni i kreacioni operatori, a ω fononske frekvencije.

S obzirom da posmatramo prostu kubnu rešetku gde je, $a_x = a_y = a_z = a$, možemo pisati:

$$u_{\alpha,n_x\pm1,n_y,n_z} = \sum_{k_x,k_y}\sum_{k_z} A_{\alpha,n_z}(k_z)\left\{b_{\alpha,k_x,k_y,k_z}e^{\pm iak_x}e^{ia(k_xn_x+k_yn_y)-it\omega_{\alpha,\vec{k}}} + \right.$$

$$\left. + b^+_{\alpha,k_x,k_y,k_z}e^{\mp iak_x}e^{-ia(k_xn_x+k_yn_y)+it\omega_{\alpha,\vec{k}}}\right\} ;$$

$$u_{\alpha,n_x,n_y\pm1,n_z} = \sum_{k_x,k_y}\sum_{k_z} A_{\alpha,n_z}(k_z)\left\{b_{\alpha,k_x,k_y,k_z}e^{\pm iak_y}e^{ia(k_xn_x+k_yn_y)-it\omega_{\alpha,\vec{k}}} + \right.$$

$$\left. + b^+_{\alpha,k_x,k_y,k_z}e^{\mp iak_y}e^{-ia(k_xn_x+k_yn_y)+it\omega_{\alpha,\vec{k}}}\right\} ;$$

$$u_{\alpha,n_x,n_y,n_z\pm 1} = \sum_{k_x,k_y}\sum_{k_z} A_{\alpha,n_z\pm 1}(k_z)\left\{b_{\alpha,k_x,k_y,k_z}e^{ia(k_xn_x+k_yn_y)-it\omega_{\alpha,\vec{k}}}+\right.$$

$$\left.+b^{+}_{\alpha,k_x,k_y,k_z}e^{-ia(k_xn_x+k_yn_y)+it\omega_{\alpha,\vec{k}}}\right\} \ ;$$

$$u_{\alpha,n_x,n_y,o} = \sum_{k_x,k_y}\sum_{k_z} A_{\alpha,o}(k_z)\left\{b_{\alpha,k_x,k_y,k_z}e^{ia(k_xn_x+k_yn_y)-it\omega_{\alpha,\vec{k}}}+\right.$$

$$\left.+b^{+}_{\alpha,k_x,k_y,k_z}e^{-ia(k_xn_x+k_yn_y)+it\omega_{\alpha,\vec{k}}}\right\} \ ;$$

$$u_{\alpha,n_x,n_y,1} = \sum_{k_x,k_y}\sum_{k_z} A_{\alpha,1}(k_z)\left\{b_{\alpha,k_x,k_y,k_z}e^{ia(k_xn_x+k_yn_y)-it\omega_{\alpha,\vec{k}}}+\right.$$

$$\left.+b^{+}_{\alpha,k_x,k_y,k_z}e^{-ia(k_xn_x+k_yn_y)+it\omega_{\alpha,\vec{k}}}\right\} \ ;$$

$$u_{\alpha,n_x,n_y,N_z} = \sum_{k_x,k_y}\sum_{k_z} A_{\alpha,N_z}(k_z)\left\{b_{\alpha,k_x,k_y,k_z}e^{ia(k_xn_x+k_yn_y)-it\omega_{\alpha,\vec{k}}}+\right.$$

$$\left.+b^{+}_{\alpha,k_x,k_y,k_z}e^{-ia(k_xn_x+k_yn_y)+it\omega_{\alpha,\vec{k}}}\right\} \ ;$$

$$u_{\alpha,n_x,n_y,N_z-1} = \sum_{k_x,k_y}\sum_{k_z} A_{\alpha,N_z-1}(k_z)\left\{b_{\alpha,k_x,k_y,k_z}e^{ia(k_xn_x+k_yn_y)-it\omega_{\alpha,\vec{k}}}+\right.$$

$$\left.+b^{+}_{\alpha,k_x,k_y,k_z}e^{-ia(k_xn_x+k_yn_y)+it\omega_{\alpha,\vec{k}}}\right\} \ ;$$

Na osnovu toga sledi:

$$\ddot{u}_{\alpha,n_x,n_y,o} = -\omega^2_{\alpha,\vec{k}}\sum_{k_x,k_y}\sum_{k_z} A_{\alpha,o}(k_z)\left\{b_{\alpha,k_x,k_y,k_z}e^{ia(k_xn_x+k_yn_y)-it\omega_{\alpha,\vec{k}}}+\right.$$

$$\left.+b^{+}_{\alpha,k_x,k_y,k_z}e^{-ia(k_xn_x+k_yn_y)+it\omega_{\alpha,\vec{k}}}\right\} \ ;$$

$$\ddot{u}_{\alpha,n_x,n_y,n_z} = -\omega^2_{\alpha,\vec{k}}\sum_{k_x,k_y}\sum_{k_z} A_{\alpha,n_z}(k_z)\left\{b_{\alpha,k_x,k_y,k_z}e^{ia(k_xn_x+k_yn_y)-it\omega_{\alpha,\vec{k}}}+\right.$$

$$\left.+b^{+}_{\alpha,k_x,k_y,k_z}e^{-ia(k_xn_x+k_yn_y)+it\omega_{\alpha,\vec{k}}}\right\} \ ;$$

$$\ddot{u}_{\alpha,n_x,n_y,N_z} = -\omega^2_{\alpha,\vec{k}}\sum_{k_x,k_y}\sum_{k_z} A_{\alpha,N_z}(k_z)\left\{b_{\alpha,k_x,k_y,k_z}e^{ia(k_xn_x+k_yn_y)-it\omega_{\alpha,\vec{k}}}+\right.$$

$$\left.+b^{+}_{\alpha,k_x,k_y,k_z}e^{-ia(k_xn_x+k_yn_y)+it\omega_{\alpha,\vec{k}}}\right\} \ .$$

Zamenom ovih izraza u jednačine (3.7), (3.8) i (3.9) dobijamo, prvo za jednačinu (3.7), tj. za $n_z = 0$:

$$-\sum_{k_x,k_y}\sum_{k_z} A_{\alpha,o}(k_z)\left\{b_{\alpha,k_x,k_y,k_z} e^{ia(k_x n_x + k_y n_y) - it\omega_{\alpha,\vec{k}}} + b^+_{\alpha,k_x,k_y,k_z} e^{-ia(k_x n_x + k_y n_y) + it\omega_{\alpha,\vec{k}}}\right\} \times$$

$$\times \left\{\frac{\omega^2_{\alpha,\vec{k}}}{\Omega^2_{\alpha\alpha}} - 6 + (e^{-iak_x} + e^{iak_x}) + (e^{-iak_y} + e^{iak_y})\right\} -$$

$$-\sum_{k_x,k_y}\sum_{k_z} A_{\alpha,1}(k_z)\left\{b_{\alpha,k_x,k_y,k_z} e^{ia(k_x n_x + k_y n_y) - it\omega_{\alpha,\vec{k}}} + b^+_{\alpha,k_x,k_y,k_z} e^{-ia(k_x n_x + k_y n_y) + it\omega_{\alpha,\vec{k}}}\right\} = 0$$

$$-\sum_{k_x,k_y}\sum_{k_z} A_{\alpha,o}(k_z)\left\{b_{\alpha,k_x,k_y,k_z} e^{ia(k_x n_x + k_y n_y) - it\omega_{\alpha,\vec{k}}} + b^+_{\alpha,k_x,k_y,k_z} e^{-ia(k_x n_x + k_y n_y) + it\omega_{\alpha,\vec{k}}}\right\}$$

$$\times \left\{\frac{\omega^2_{\alpha,\vec{k}}}{\Omega^2_{\alpha\alpha}} - 4\sin^2\frac{ak_x}{2} - 4\sin^2\frac{ak_y}{2} - 2\right\} -$$

$$-\sum_{k_x,k_y}\sum_{k_z} A_{\alpha,1}(k_z)\left\{b_{\alpha,k_x,k_y,k_z} e^{ia(k_x n_x + k_y n_y) - it\omega_{\alpha,\vec{k}}} + b^+_{\alpha,k_x,k_y,k_z} e^{-ia(k_x n_x + k_y n_y) + it\omega_{\alpha,\vec{k}}}\right\} = 0$$

Ako je:

$$\varrho_{\alpha,\vec{k}} = \frac{\omega^2_{\alpha,\vec{k}}}{\Omega^2_{\alpha\alpha}} - 4\sin^2\frac{ak_x}{2} - 4\sin^2\frac{ak_y}{2} - 2 \tag{3.11}$$

tada sledi prva jednačina:

$$A_{\alpha,1}(k_z) + \varrho_{\alpha,\vec{k}} A_{\alpha,o}(k_z) = 0 \tag{3.12}$$

Na isti način zamenom izraza u jednačinu (3.8) dobijamo:

$$-\sum_{k_x,k_y}\sum_{k_z} A_{\alpha,n_z}(k_z)\left\{b_{\alpha,k_x,k_y,k_z} e^{ia(k_x n_x + k_y n_y) - it\omega_{\alpha,\vec{k}}} + b^+_{\alpha,k_x,k_y,k_z} e^{-ia(k_x n_x + k_y n_y) + it\omega_{\alpha,\vec{k}}}\right\}$$

$$\times \left\{\frac{\omega^2_{\alpha,\vec{k}}}{\Omega^2_{\alpha\alpha}} - 6 + (e^{-iak_x} + e^{iak_x}) + (e^{-iak_y} + e^{iak_y})\right\} -$$

$$-\sum_{k_x,k_y}\sum_{k_z} A_{\alpha,n_z+1}(k_z)\left\{b_{\alpha,k_x,k_y,k_z} e^{ia(k_x n_x + k_y n_y) - it\omega_{\alpha,\vec{k}}} + b^+_{\alpha,k_x,k_y,k_z} e^{-ia(k_x n_x + k_y n_y) + it\omega_{\alpha,\vec{k}}}\right\}$$

$$-\sum_{k_x,k_y}\sum_{k_z} A_{\alpha,n_z-1}(k_z)\left\{b_{\alpha,k_x,k_y,k_z} e^{ia(k_x n_x + k_y n_y) - it\omega_{\alpha,\vec{k}}} + b^+_{\alpha,k_x,k_y,k_z} e^{-ia(k_x n_x + k_y n_y) + it\omega_{\alpha,\vec{k}}}\right\} = 0$$

Sredjivanjem ove jednačine i na osnovu (3.11) dobijamo drugu jednačinu:

$$A_{\alpha,n_z+1}(k_z) + A_{\alpha,n_z-1}(k_z) + \varrho_{\alpha,\vec{k}} A_{\alpha,n_z} = 0 \tag{3.13}$$

Konačno, zamenom odgovarajućih izraza u (3.9) dobijamo:

$$-\sum_{k_x,k_y}\sum_{k_z} A_{\alpha,N_z}(k_z)\left\{b_{\alpha,k_x,k_y,k_z} e^{ia(k_x n_x + k_y n_y) - it\omega_{\alpha,\vec{k}}} + b^{+}_{\alpha,k_x,k_y,k_z} e^{-ia(k_x n_x + k_y n_y) + it\omega_{\alpha,\vec{k}}}\right\}$$

$$\times \left\{\frac{\omega^2_{\alpha,\vec{k}}}{\Omega^2_\alpha} - 6 + (e^{-iak_x} + e^{iak_x}) + (e^{-iak_y} + e^{iak_y})\right\} -$$

$$-\sum_{k_x,k_y}\sum_{k_z} A_{\alpha,N_z-1}(k_z)\left\{b_{\alpha,k_x,k_y,k_z} e^{ia(k_x n_x + k_y n_y) - it\omega_{\alpha,\vec{k}}} + b^{+}_{\alpha,k_x,k_y,k_z} e^{-ia(k_x n_x + k_y n_y) + it\omega_{\alpha,\vec{k}}}\right\} = 0$$

Sredjivanjem ove jednačine i na osnovu (3.11) dobijamo i treću jednačinu:

$$A_{\alpha,N_z-1}(k_z) + \varrho_{\alpha,\vec{k}} A_{\alpha,N_z}(k_z) = 0 \tag{3.14}$$

Tako smo dobili sistem od $N_z + 1$ homogenih jednačina:

$$\begin{gathered} A_{\alpha,1}(k_z) + \varrho_{\alpha,\vec{k}} A_{\alpha,o}(k_z) = 0 \\ A_{\alpha,n_z+1}(k_z) + A_{\alpha,n_z-1}(k_z) + \varrho_{\alpha,\vec{k}} A_{\alpha,n_z}(k_z) = 0 \\ A_{\alpha,N_z-1}(k_z) + \varrho_{\alpha,\vec{k}} A_{\alpha,N_z}(k_z) = 0 \end{gathered} \tag{3.15}$$

Da bi ovaj sistem homogenih jednačina imao netrivijalnih rešenja, mora determinanta tog sistema biti jednaka nuli.

$$D_{N_z+1}(\varrho) = \begin{vmatrix} \varrho & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & \varrho & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \varrho & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & \ddots & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & \varrho & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & \varrho & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & \varrho \end{vmatrix} = 0 \ , \quad \varrho \equiv \varrho_{\alpha;k_x,k_y,\nu_z} \, .$$

Ova determinanta predstavlja jedan od oblika Čebiševljevih polinoma druge vrste i može se pisati u obliku:

$$D_{N_z+1}(\varrho) = \frac{\sin[(N_z+2)\xi_{\nu_z}]}{\sin\xi_{\nu_z}} \qquad \xi_{\nu_z} \neq 0\,; \tag{3.16}$$

pri čemu je:

$$\varrho = 2\cos\xi_{\nu_z} \tag{3.17}$$

Izjednačavajući determinantu sa nulom, dobijamo:

$$\xi_{\nu_z} = \frac{\pi \nu_z}{N_z + 2} \qquad \nu_z = 1, 2, 3, \ldots, N_z + 1 \,. \tag{3.18}$$

Zamenom izraza (3.17), (3.18) u izraz (3.11) dobijamo:

$$2 \cos \frac{\pi \nu_z}{2(N_z + 2)} = \frac{\omega^2_{\alpha,k_x,k_y,\nu_z}}{\Omega^2_{\alpha\alpha}} - 4[\sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y}{2}] - 2 \,.$$

Ovaj izraz možemo rešiti po nepoznatim frekvencijama ω:

$$\omega_{\alpha,k_x,k_y,\nu_z} = 2\Omega_{\alpha\alpha} \sqrt{\sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y}{2} + \cos^2 \frac{\pi \nu_z}{2(N_z + 2)}} \,, \tag{3.19}$$

Nakon izmene indeksa $\mu_z = N_z + 2 - \nu_z$ ova formula dobija simetričan oblik:

$$\omega_{\alpha,k_x,k_y,\mu_z} = 2\Omega_{\alpha\alpha} \sqrt{\sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y}{2} + \sin^2 \frac{\pi \mu_z}{2(N_z + 2)}} \,,$$

Konačan izraz za tražene fononske frekvencije možemo napisati u obliku:

$$\omega_{\alpha,\vec{k}} = 2\Omega_{\alpha\alpha} \sqrt{\sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y}{2} + \sin^2 \frac{ak_z}{2}} \,. \tag{3.20}$$

pri čemu je:

$$k_z = \frac{\pi}{a} \frac{\mu_z}{N_z = 2} \,; \qquad \mu_z = 1, 2, 3, \ldots, N_z + 1 \tag{3.21}$$

Uočimo da, za razliku od k_x i k_y čija je minimalna vrednost jednaka nuli, $k_z^{min} = \frac{1}{N_z+2}\frac{\pi}{a} > 0$, jer je $N_z \ll (N_x, N_y)$.

Ako sistem jednačina (3.15) podelimo sa nultom amplitudom A_o dobijamo ovaj sistem jednačina u novom obliku:

$$B_1 + \varrho = 0 \,, \qquad \text{za } n_z = 0 \tag{3.22}$$

$$B_2 + \varrho B_1 + 1 = 0 \,, \qquad \text{za } n_z = 1 \tag{3.23}$$

$$B_{n_z+1} + B_{n_z-1} + \varrho B_{n_z} = 0 \,, \qquad \text{za } 2 \leq n_z \leq N_z - 1 \tag{3.24}$$

gde je $B_{n_z} \equiv B_{\alpha,n_z} = A^{-1}_{\alpha,o} A_{\alpha,n_z}$. Jednačina (3.24) je zadovoljena za:

$$B_{n_z} = (-1)^{n_z} \{p \sin(\xi n_z) + q \sin[\xi(n_z - 1)]\} \,, \tag{3.25}$$

a na osnovu toga i (3.17) sledi:

$$B_1 = -p \sin \xi \,;$$

$$B_2 = p \sin(2\xi) + q \sin \xi \,.$$

Zamenjujući ove izraze u (3.22) dobijamo koeficijente p i q kao:

$$p = \frac{\varrho}{\sin\xi}\,; \quad q = -\frac{1}{\sin\xi}\,; \quad \xi \neq 0$$

Vraćajući izraze za p i q u (3.25) dobijamo:

$$B_{n_z} = (-1)^{n_z}\frac{\sin[\xi(n_z+1)]}{\sin\xi} \tag{3.26}$$

iz čega sledi:

$$A_{\alpha,n_z;\nu_z} = (-1)^{n_z}\frac{\sin(n_z+1)\xi_{\nu_z}}{\sin\xi_{\nu_z}}A_{\alpha;0}\,. \tag{3.27}$$

Kombinovanjem jednačina (3.27), (3.10) i (3.2) svodimo hamiltonijan H_{if} na dijagonalni oblik:

$$H_{if} = \sum_{\alpha,\vec{k}} E_{\alpha,\vec{k}}[b^+_{\alpha,\vec{k}}b_{\alpha,\vec{k}} + \frac{1}{2}]\,. \tag{3.28}$$

Konačno, zakon disperzije za fonone u tankom nedeformisanom filmu na osnovu (3.20) i (3.21) je:

$$E_{\alpha,\vec{k}} = \hbar\omega_{\alpha,\vec{k}} = 2E_o\sqrt{\sin^2\frac{ak_x}{2} + \sin^2\frac{ak_y}{2} + \sin^2\frac{ak_z}{2}}\,. \tag{3.29}$$

gde je $E_o = \hbar\Omega_{\alpha\alpha}$.

U skladu sa tim dobijamo konačan izraz za fononske pomeraje u obliku:

$$u_{\alpha,\vec{n}}(0) = \sum_{\vec{k}}(-1)^{n_z}\sqrt{\frac{\hbar}{MN_xN_y(N_z+2)\omega_{\alpha,\vec{k}}}}\Big\{b_{\alpha,\vec{k}}e^{ia(k_xn_x+k_yn_y)} +$$

$$+ b^+_{\alpha,\vec{k}}e^{-ia(k_xn_x+k_yn_y)}\Big\}\cdot\sin[(n_z+1)ak_z]\,. \tag{3.30}$$

Uporedjujući dobijene rezultate sa odgovarajućim idealnim beskonačnim strukturama može se zaključiti sledeće:

a) mehaničke vibracije u idealnoj beskonačnoj strukturi su ravni talasi u svim smerovima a mehaničke vibracije u tankom filmu su spoj stojećih talasa u z - pravcu i ravnih talasa u XY ravnima.

b) amplituda pomaka u filmovima je $\sim 10^4\sqrt{\frac{2}{N_z}}(N_z \sim 10^3 - 10^4)$ puta veća nego amplituda pomaka u idealnim beskonačnim strukturama, što sledi iz (3.30).

c) tri akustičke frekvencije u masenim strukturama teže nuli kada k teži nuli. S druge strane, minimalne frekvencije u tankom filmu su date kao:

$$min\{\omega_{\alpha,k_x,k_y,\mu_z}\} \equiv \omega_{\alpha;(k_x=k_y=0,k_z=k_z^{min})} = 2\Omega_{\alpha\alpha}\sin[\frac{\pi}{2(N_z+2)}] \neq 0$$

To znači da fononi u tankim filmovima poseduju fononski gep $\hbar\omega_{\alpha;min}$, odakle sledi da je aktivaciona temperatura filma:

$$T_{ac} = \frac{\hbar\omega_{\alpha;min}}{k_B} = \frac{2\hbar}{k_B}\Omega_{\alpha\alpha}\sin[\frac{\pi}{2(N_z+2)}]$$

tj. temperatura neophodna za eksitaciju fonona data gornjim izrazom, ima konačnu pozitivnu vrednost.

Vidi se da aktivaciona temperatura opada sa povećanjem debljine filma, tj. sa porastom N_z. Za izuzetno tanke filmove aktivaciona temperatura je relativno visoka. Na osnovu ove činjenice viša superprovodna kritična temperatura u filmovima mogla bi biti objašnjena npr. time da se do T_{ac} film se ponaša kao apsolutno "zamrznuta" struktura i sve dok se ne postigne ta temperatura u sistemu nisu prisutni realni fononi. Jasno je da bi se elektroni, sve do ovih temperatura u tankoj strukturi mogli kretati bez trenja, tj. bezotporno.

Prema tome, prisustvo fononskog gepa i odgovarajuće aktivacione temperature za pobudjivanje fonona, predstavlja možda moguće objašnjenje činjenice da tanki filmovi imaju višu kritičnu temperaturu, nego masene idealne beskonačne strukture.

4. ZAKLJUČAK

Ispitujući i uporedjujući fononske spektre i stanja u idealnim i film - strukturama došli smo do sledećih zaključaka:

1. Mehaničke vibracije u idealnim beskonačnim strukturama su ravni talasi u svim smerovima, dok u tankim filmovima predstavljaju spoj stojećih talasa u z - pravcu i ravnih talasa u XY - ravnima.

2. Amplituda fononskih pomeraja u filmovima zavisi od debljine filma i $\sim 10^4\sqrt{\frac{2}{N_z}}$ puta je veća nego u idealnim strukturama. To znači da se tu ima veći elastični "manevarski prostor", bez kidanja medjuatomskih veza, što vodi većoj otpornosti i višoj tački topljenja kod filmova u odnosu na masene uzorke.

3. Sve tri akustičke frekvencije u masenim strukturama teže nuli kad $\vec{k} \to 0$, dok u tankom filmu teže nekoj minimalnoj vrednosti koja zavisi od debljine filma. To znači da fononi u tankim strukturama poseduju energetski gep. Za njihovo pobudjivanje treba uložiti energiju ili ih zagrevati do odredjene aktivacione temperature T_{ac}, što znači da se sistem do T_{ac} ponaša kao "zamrznut", tj. fononi nisu prisutni.

Nesumnjivo se može zaključiti da su ove analize pokazale da su filmovi bolji superprovodnici od odgovarajućih masivnih uzoraka, koji su napravljeni od istog materijala i iste kristalne strukture. Ova opitna činjenica je potkrepljena sledećim rezultatima:

a) U film - strukturama se javljaju stojeći talasi duž z - pravca što je odlika superprovodnika. U idealnim strukturama, gde imamo ravne talase, ove odlike nema.

b) Veće vrednosti amplituda fononskih pomeraja u filmovima ukazuju na mogućnost dugometnije fononske interakcije sa drugim pobudjenjima (elektronima ili šupljinama). To ima za posledicu veći radijus Kuperovih parova koji se ovde stvaraju.

c) Pojava energetskog gepa u fononskom spektru film - struktura znači da se sve do aktivacione temperature T_{ac} ovi sistemi ponašaju kao zamrznuti, bez mehaničkih vibracija koji bi stvarali otpor provodjenju električne struje.

Svi ovi zaključci su kvalitativne prirode i odnose se na promenu fononskih stanja i spektra pod uticajem prisustva granica strukture, kao i mogući uticaj tih promena na fizičke karakteristike sistema. Zbog toga što su uračunati samo fononski uticaji, ne mogu se smatrati konačnim.

Nastavak istraživanja treba da ispita uticaj granica na spektre i stanja drugih elementarnih pobudjenja i nosilaca naelektrisanja i na njihovu medjusobnu interakciju u prisustvu izmenjenog fononskog polja. Na osnovu takvih rezultata moći će nešto konkretnije da se kaže o veličinama superprovodnih karakteristika film - struktura.

5. Literatura

[1] B.S.Tošić, *Statistička fizika* , PMF IF, Novi Sad 1978.

[2] A.S.Davydov, *Teoriya tverdogo tela,* Nauka, Moskva 1976.

[3] L.I.Šif, *Kvantna mehanika,* V.Karadžić, Beograd 1968.

[4] Ch.Kittel, *Uvod u fiziku čvrstog stanja,* Sav.Admin. Beograd 1970.

[5] M.I.Kaganov, *Elektrony, fonony, magnony,* Nauka, Moskva 1979.

[6] M.Pantić, *Fononska stanja u strukturama sa narušenom simetrijom,* Mr teza, FF PMF Beograd 1993.

[7] B.S.Tošić, J.P.Šetrajčić, D.Lj.Mirjanić, Z.V.Bundalo, *Physica A* **184** (1992) 354.