PREDMET: Kvantna mehanika

Mentor: Dr. Bratislav Tošić

DIPLOMSKI RAD:

TEMA: F O N O N I U T A N K I M F I L M O V I M A

Boško J. Jokanović

Ovom prilikom želim još jednom da se iskreno zahvalim rukovodiocu ovog rada Dr. Bratislavu Tošiću na korisnim i konkretnim savetima pri pisanju i sastavljanju ovog mog rada.

Boško J. Jokanović

S A D R Ž A J

U V O D

U V O D

Cilj ovog diplomskog rada je ispitivanje stanja mehaničkih oscilacija u tankim pločama (tankim filmovima). Debljina ovakve ploče treba da bude takva da se konstanta rešetke a ne može zanemariti u odnosu na samu debljinu. Drugim rečima ploča treba da sadrži oko 50 slojeva.

Ispitivanje ovakvih sistema značajno je iz mnogih razloga od kojih je možda praktično najvažniji taj što su uslovi za realizaciju superkonduktivnog stanja elektrona bolji u jednim i dvodimenzionalnim strukturamaa nego u trodimenzionalnim strukturama. Pošto efekt superkonduktivnosti bitno zavisi od elektron-fononske interakcije , smatram da ispitivanje fononskog stanja u ploči je neophodan uslov za analizu efekata višeg reda , konkretno za analizu elektron-fonoske interakcije i uslov za realizaciju superkonduktivnog stanja u ploči. Ovim poslednjim problemom mi se nećemo posebno baviti - naš cilj je da damo osnovne karaktaristike fononskih stanja, da bi se na osnovu njih mogao analizirati gore pomenuti problem.

I glava

Mehaničke oscilacije u kristalima kao kolektivni efekat

1. Fononi u jednodimenzionalnoj rešetci

U ovom paragrafu razmatraćemo i analizirati prostu jednodimenzionalnu kristalnu rešetku, sastavljenu od niza atoma iste mase μ koji su pomereni jedan u odnosu na drugi za konstantu rešetke a. Potencijalna energija ovog sistema ima oblik:

$$U=\frac{1}{2}\sum_{nm}V(n-m), \qquad 1.1$$

gde su n ~~im~~ i m mesta atoma u rešetci, a V je potenicijal koji zavisi od rastojanja $(n-m)$. Znači da potencijalna energija zavisi od rastojanja izmedju dva atoma.

Kada jedan atom izvedemo iz ravnotežnog položaja, pošto je u pitanju sistem vezanih oscilatora, nastaje pomeranje poremećaja duž samog pravca. Potencijalna energija atoma n i m, koji se longitudinalno pomeraju za veličine U_n, U_m respektivno je oblika:

$$U=\frac{1}{2}\sum_{nm}V\left[(n-m)+(U_n-U_m)\right]. \qquad 1.2$$

Izraz pod sumom se razvija u Tajlorov red zbog predpostavke da su pomaci mali. Zadržavamo se na kvadratnim članovima (ostajemo u Harmoninskoj aproksimaciji), a pošto analiziramo samo fonone prvi odbacujemo član.

Efektivna potencijalna energija stvorena usled fononskih pomeraja je:

$$U^f_{efe}=\frac{1}{2}\sum_{nm}\frac{\partial^2 V(n-m)}{\partial(n-m)^2}(U_n-U_m)^2. \qquad 1.3$$

Pri daljoj analizi koristi se aproksimacija najbližih suseda pa se sumira samo po n tj. m uzima vrednosti $n+1$ i $n-1$ za n. Pošto interakcija zavisi samo od rastojanja dobijemo:

$$U=\frac{1}{4}f_0\left[\sum_n(U_n-U_{n+1})^2+\sum_n(U_n-U_{n-1})^2\right]$$

gde je:

$$f_0 = f(n-m) = \frac{\partial^2 V(n-m)}{\partial (n-m)^2} \,, \qquad 1.4$$

predstavlja konstantu.

Pod predpostavkom da je rešetka beskonačna, prelazimo sa n na $n+1$ u drugoj sumi, konačan izraz za efektivnu potencijalnu energiju je:

$$U_{ef} = \frac{1}{2} f_0 \sum_n \left(U_n - U_{n+1}\right)^2 . \qquad 1.5$$

Sila koja deluje na n - ti atom u rešetci usled pomaka je:

$$F_n = -\frac{\partial U_{ef}}{\partial U_n} = -f_0 \left[2U_n - U_{n+1} - U_{n-1}\right] . \qquad 1.6$$

Diferencijalna jednačina kretanja n - tog atoma je:

$$m\ddot{U}_n = -f_0 \left[2U_n - U_{n+1} - U_{n-1}\right] , \qquad 1.7$$

čije ~~je~~ rešenje se traži u obliku ravnog talasa:

$$U_n = A e^{ikna - i\omega(k)t} . \qquad 1.8$$

Rešavajući jednačinu 1.7 uz primenu rešenja 1.8 dobijemo izraz:

$$\omega = 2\sqrt{\frac{f_0}{m}} \left(\sin\frac{ka}{2}\right) . \qquad 1.9$$

Izraz 1.9 naziva se disperzioni zakon. Iz njega se uočava da frekvencija vezanog oscilatora linearno zavisi od talasnog vektora (k). Za $ka \ll 1$; $\omega = \omega_0 ka$ (ω_0 - frekvencija oscilatora koji osciluje kad na njega ne deluje drugi osicilator), fononi u ovom slučaju predstavljaju talase u sistemu.

Naš cilj je da od sistema vezanih oscilatora predjemo na sistem nevezanih (nezavisnih) oscilatora. U tom slučaju polazimo od hamiltonijana tog sistema:

$$H = T + U = \frac{m}{2}\sum_n \dot{U}_n^2 + \frac{f_0}{2}\sum_n \left(U_n - U_{n+1}\right)^2 , \qquad 1.10$$

i pomeraj pišemo u obliku:

$$U_n = \sum_k \sqrt{\frac{\hbar}{2mN\omega(k)}} \left\{ b_k e^{ikna - i\omega(k)t} + b_k^+ e^{-ikna + i\omega(k)t} \right\}$$

(razvoj po ravnim talasima). 1.11

Napomena: gde su b_k, b_k^+ Boze operatori koji kreiraju i anhiliraju fonone.

Izrazi za kinetičku i potencijalnu energiju sistema:

$$T=\frac{\hbar}{4}\sum_{k}\omega(k)\left[b_k b_k^{+}+b_k^{+}b_k-b_k b_k e^{-2i\omega(k)t}-b_k^{+}b_k^{+}e^{2i\omega(k)t}\right]$$

$$U=\frac{\hbar}{4}\sum\omega(k)\left[b_k b_k^{+}+b_k^{+}b_k+b_k b_k e^{-2i\omega(k)t}+b_k^{+}b_k^{+}e^{2i\omega(k)t}\right],$$

odnosno hamiltonijan sistema je:

$$H=\sum_{k}\frac{\hbar}{2}\omega(k)\left[b_k b_k^{+}+b_k^{+}b_k\right],$$

kako je $b_k b_k^{+}-b_k^{+}b_k=1$ to je:

$$H=\sum_{k}\hbar\omega(k)\left(b_k^{+}b_k+\frac{1}{2}\right). \qquad 1.12$$

Sistem vezanih oscilatora sveden je na sumu nezavisnih oscilatora.

2. Fononi u trodimenzionalnoj strukturi

U prvom paragrafu razmatrao se slučaj proste jednodimenziona kristalne rešetke. Razmatraćemo kristal čija elementarna ćelija sadrži σ atoma i koji je odredjen sa tri osnovna vektora a_1, a_2, a_3. Radi eliminisanja efekata krajeva uvode se ciklični uslovi sa velikim periodama N_1a_1, N_2a_2, N_3a_3. Ovakvi granični uslovi odgovaraju beskonačnom ponavljanju u svim osnovnim pravcima kristala koji sadrži $N=N_1N_2N_3$ elementarnih ćelija i $N\sigma$ atoma.

Ravnotežni položaji atoma odredjeni su vektorom rešetke:

$$\vec{n}=\sum_{n=1}^{3}n_i a_i,$$

koji odredjuje položaj elementarne ćelije, i brojem α koji odredjuje položaj atoma u elementarnoj ćeliji. Pod predpostavkom da je pomeranje atoma malo u odnosu na konstantu rešetke, pri razvoju potencijalne energije po stepenima pomeranja, mogu se odbaciti kvadratni i viši članovi.

Energija malih oscilacija atoma u ravnotežnom položaju je:

$$H = \frac{1}{2}\sum_{\vec{n},\alpha,x}\left\{M_\alpha\left(\dot{\xi}^{x}_{\vec{n}\alpha}\right)^2 + \sum_{\vec{n}',\alpha',x'}\lambda^{xx'}_{\alpha\alpha'}(\vec{n}-\vec{n}')\,\xi^{x}_{\vec{n}\alpha}\,\xi^{x'}_{\vec{n}'\alpha'}\right\}, \qquad 2.1$$

a klasična jednačina kretanja ima oblik:

$$M_\alpha \ddot{\xi}^{x}_{\vec{n}\alpha} + \sum_{\vec{n}'\alpha'x'}\lambda^{xx'}_{\alpha\alpha'}(\vec{n}-\vec{n}')\,\xi^{x'}_{\vec{n}'\alpha'} = 0\,, \qquad 2.2$$

gde je M_α - masa atoma na mestu α u ćeliji; $\xi^{x}_{\vec{n},\alpha}$ x-ta komponenta pomeraja iz njegovog ravnotežnog položaja; $\lambda^{xx'}_{\alpha\alpha'}(\vec{n}-\vec{n}')$ - koeficijent koji zavisi samo od razlike $\vec{n}-\vec{n}'$.

Rešenje jednačine 2.2 , s obzirom na translaciju simetrije traži se u obliku :

$$\xi_{\vec{n}\alpha}(\vec{q}) = \vec{e}_\alpha(\vec{q})\,e^{i(\vec{q}\vec{n} \pm \omega_q t)}. \qquad 2.3$$

Zbog cikličnih graničnih uslova s velikim periodama mora biti:

$$\vec{q} = 2\pi\sum_{i=1}^{3}\frac{\nu_i}{N_i}\,b_i\ ;\ \text{gde je } -\frac{N_i}{2} < \nu_i \ll \frac{N_i}{2}\,, \qquad (i=1,2,3)$$

(b_i - vektor recipročne rešetke, a vektor $\vec{e}_\alpha(\vec{q})$ karakteriše pravac talasa datog talasnog vektora $\vec{q}$). Njihove Dekartove komponente su odredjene kao rešenja sistema jednačina:

$$\sum_{x'\alpha'} L^{xx'}_{\alpha\alpha'}(\vec{q})\,e^{x'}_{\alpha'} - \omega^2_q M_\alpha e^{x}_\alpha = 0\,, \qquad 2.4$$

koje se dobija kad se 2.3 zameni u 2.2.

Koeficijenti iz jednačine 2.4 su: $L^{xx'}_{\alpha\alpha'}(\vec{q}) \equiv \sum_{\vec{n}'}\lambda^{xx'}_{\alpha\alpha'}(\vec{n}-\vec{n}')\,e^{i\vec{q}(\vec{n}-\vec{n}')}$,

i obrazuju Ermitovu matricu. Iz sistema jednačina 2.4 može se odrediti kvadrat sopstvenih frekvencija malih oscilacija. Uslov rešivosti tog sistema svodi se na jednačinu reda 3σ gde je 3σ - broj stepeni slobode unutar jedne elementarne ćelije

$$\left| L^{xx'}_{\alpha\alpha'}(\vec{q}) - \omega^2_{\vec{q}}\, M_\alpha\, \delta_{\alpha\alpha'}\delta_{xx'}\right| = 0\,.$$

Svi koreni (rešenja) jednačine su realne i pozitivne funkcije q . Od 3σ frekvencija ω_j ($j=1,2,\ldots 3\sigma$) tri frenkvencije teže nuli za $\vec{q}=0$ (to su akustične grane oscilacija), a ostale $3(\sigma-1)$ različite su od nule za $\vec{q}\to 0$ (optičke grane oscilacija). Akustične grane se karakterišu time što rešetka osciluje u celini kao neprekidna sredina. Optičke grane se karakterišu time što se atomi kreću u jednoj istoj ćeliji jedan u odnosu na drugi. Za prostu kubnu strukturu, gde postoji samo jedan atom u elementarnoj ćeliji i za koju će biti izračunat srednji slobodni put, postoje samo akustičke grane. Svakoj frekvenciji $\omega_j(\vec{q})$ odgovara skup realnih vektora $\vec{e}_{\alpha j}$, koji uzimaju 3σ vrednosti i obrazuju ortogonalni sistem pogodan za normiranje:

$$\sum_{\alpha=1}^{3} \vec{e}_{\alpha j}\, e_{\alpha \ell} = \delta_{j\ell} \qquad 2.5$$

Elementarni pomeraj atoma u ćeliji za j - granu i sa talasnim vektorom piše se:

$$\vec{\xi}^{\,j}_{\vec{n}\alpha}(\vec{q}) = \vec{e}_{\alpha j}(\vec{q})\, e^{i[\vec{q}\vec{n} \pm \omega_j(\vec{q})t]}.$$

Proizvoljni pomeraj istog atoma koji predstavlja superpoziciju elementarnih pomeraja po svim granama oscilacija i svim vrednostima talasnog vektora $\vec{q}$ je:

$$\vec{\xi}_{\vec{n},\alpha} = \sum_{j,\vec{q}} \left[\frac{\hbar}{2M_\alpha N \omega_j(\vec{q})}\right]^{1/2} \vec{e}_{\alpha j}(\vec{q}) \left\{ a_{\vec{q}j} e^{i\vec{q}\vec{n}} + a^*_{\vec{q}j} e^{-i\vec{q}\vec{n}} \right\} \qquad 2.6$$

Pomeraj je realna veličina i napisana je u kompleksnoj ravni. Faktor normiranja izabran je ovako radi pogodnosti, a vremenska zavisnost pomeraja uključena je u koeficijent $a_{\vec{q}j}$ preko:

$$\frac{d a_{\vec{q}j}}{dt} = -i\omega_j(\vec{q})\, a_{\vec{q}j}. \qquad 2.7$$

Zamenjujući 2.6 u 2.1 uračunavajući 2.4 a za veliko N važi:

$$\sum_{\vec{n}} e^{i(\vec{q}-\vec{q}')\vec{n}} = N\delta_{\vec{q},\vec{q}'}, \qquad 2.8$$

pokazuje se da je hamiltonijan predstavljen kao suma hamiltonijana nezavisnih oscilatora. Ukupan broj tih oscilatora je $3N\sigma$, i formula je oblika:

$$H_{k\ell} = \frac{1}{2}\sum_{j\vec{q}} \hbar\omega_j(\vec{q}) \left\{ a_{\vec{q}j} a^*_{\vec{q}j} + a^*_{\vec{q}j} a_{\vec{q}j} \right\}. \qquad 2.9$$

Uvodeći u hamiltonijan Boze operatore umesto kompleksnih amplituda $a_{\vec{q}j}$, $a^*_{\vec{q}j}$ preko:

$$[\hat{a}_{\vec{q}j}, \hat{a}_{\vec{q}'j'}] = [\hat{a}^+_{\vec{q}j}, \hat{a}^+_{\vec{q}'j'}] = 0$$

$$[\hat{a}_{\vec{q}j}, \hat{a}^+_{\vec{q}'j'}] = [\delta_{\vec{q}\vec{q}'}, \delta_{jj'}], \qquad 2.10$$

dobijamo kvantni hamiltonijan u obliku:

$$\hat{H} = \sum_{\vec{q}j} \hbar \omega_j(\vec{q})\, \hat{a}^{+}_{\vec{q}j} \cdot \hat{a}_{\vec{q}j} + E_0 \qquad 2.11$$

gde je:

$$E_0 = \frac{1}{2} \sum_{\vec{q},j} \hbar \omega_j(\vec{q})$$

energija osnovnog stanja - energija vakuma ili energija nultih oscilacija. Talasna funkcija osnovnog stanja označava se $|0>$, a talasna funkcija $|1\vec{q}_j> \hat{a}^{+}_{\vec{q}j}|0>$, karakteriše stanje sa jednim fononom, čija energija je $\hbar \omega_j(\vec{q})$. Napomenimo da je fononsko pobudjivanje posledica kolektivnog pobudjivanja uzajaminih interakcija atoma u kristalu. Stanje sa n - jednakih fonona odredjeno je talasnom funkcijom $|n\vec{q}_j> (n\vec{q}_j!)^{-\frac{1}{2}} (a^{+}_{\vec{q}j})^n |0>$, a energija je $n\hbar\omega_j(\vec{q})$. Kako talasna funkcija stanja sa n jednakih fonona zavisi samo od broja fonona, ona se ne menja pri permutaciji fonona. Elementarno kvantno pobudjivanje oscilatornog sistema u kristalu - fononi, su Boze čestice. Zato se fononi moraju pokoravati Boze - Ajnštanovoj statistici. Prema tome u svakom kvantnom stanju može se naći proizvoljan broj fonona. Srednji broj fonona u kvantnom stanju je dat sa :

$$\bar{n}_p = \frac{1}{e^{\varepsilon(p)/kT} - 1} .$$

U izotropnom telu postoji jedan longitudinalni i dva transvezalna zvučna talasa (talas duž ~~normale~~ i normalan na talasni vektor $\vec{q}$). Transvezalni talasi imaju brzinu koja je manja od brzine longitudinalnih talasa.

Prema 2.6 jednačini može se izračunati pomeraj atoma koji zauzima n - to mesto u rešetci pri pobudjivanju, ali za kristal sa jednim atomom u elementarnoj ćeliji. Sa kompleksnih amplituda $a_{\vec{q}j}$ i $a^{*}_{\vec{q}j}$ prelazimo na Boze operatore fonona, pa operator $\hat{\xi}_{\vec{n}j}$ se predstavlja kao suma dva člana:

$$\hat{\xi}_{\vec{n}j} = \hat{\xi}^{(-)}_{\vec{n}j} + \hat{\xi}^{(+)}_{\vec{n}j} \qquad 2.12$$

gde je:

$$\hat{\xi}^{(-)}_{\vec{n}j} = \sqrt{\frac{\hbar}{2MN}} \sum_{q} \vec{e}_j(\vec{q})\, \omega_j^{-\frac{1}{2}}(\vec{q})\, \hat{a}_{\vec{q}j}\, e^{-i\vec{q}\vec{n}} \qquad 2.13$$

operator koji odgovara anhilaciji fonona i

$$\hat{\xi}^{(+)}_{\vec{n}j} = \sqrt{\frac{\hbar}{2MN}} \sum_{q} \vec{e}_j(\vec{q})\, \omega_j^{-\frac{1}{2}}(\vec{q})\, \hat{a}^{+}_{\vec{q}j}\, e^{-i\vec{q}\vec{n}} \qquad 2.14$$

operator koji odgovara kreiranju fonona.

3. Termodinamika fononskog sistema

Na primeru čvrstog tela se mogu veoma dobro primeniti statistički metodi izračunavanja termodinamičkih veličina. Karakteristična svojstva ovih tela sastoje se u tome da njihovi atomi vrše samo male oscilacije oko nekih ravnotežnih položaja - "čvorova" kristalne rešetke. U toplotnoj ravnoteži čvrsto telo mora biti k r i s t a l n o. Prema klasičnoj mehanici svi atomi na apsolutnoj nuli miruju, a potencijalna energija njihove interakcije mora biti minimalna. Prema tome dovoljno niske temperature uslovljavaju da atomi moraju vršiti male oscilacije, tela moraju biti čvrsta. Da bi telo bilo čvrsto uslov je da njegova temperatura bude dovoljno niska. Slobodna energija čvrstog tela izračunava se po formuli:

$$F = N\varepsilon_0 + kT\sum_{\alpha} \ln\left(1 - e^{-\frac{h\omega_\alpha}{kT}}\right), \qquad 3.1$$

N - broj molekula; ν broj atoma u molekuli.

Sumiranje se vrši po svim $3N\nu$ normalnim oscilacijama koje se numerišu indeksom α.

Član $N\varepsilon_0$ je energija interakcija atoma tela u ravnotežnom položaju (stanje nulte oscilacije), gde je ε_0 funkcija gustine tela: $\varepsilon_0 = \varepsilon_0\left(\frac{V}{N}\right)$.

a) Niske temperature

Za $h\omega_\alpha \sim kT$ (mala vrednost za kT).

Oscilacije sa malim frekvencijama su obično zvučni talasi čija dužina je povezana sa frekvencijom preko: $\lambda \sim \frac{u}{\omega}$ (u - brzina zvuka). Kod ovih talasa $\omega \ll \frac{u}{a}$ tj. talasna dužina je velika u odnosu na konstantu rešetke a.

Prema tome da bi se oscilacije mogle posmatrati kao zvučni talasi temperatura mora zadovoljavati uslov: $kT \ll \frac{hu}{a}$. 3.2

Slobodna energija za kristale za ovakav slučaj oblika je:

$$F = N\varepsilon_0 + kT\frac{3V}{2\pi^2\bar{u}^3}\int_0^\infty \ln\left(1 - e^{\frac{-h\omega}{kT}}\right)\omega^2 d\omega, \qquad 3.3$$

Gde je:
$$\bar{U} = \bar{U}\left(\frac{V}{N}\right)$$
i
$$g(\omega) = V\frac{3\omega^2 d\omega}{2\pi^2 \bar{u}^3} \,. \qquad 3.4$$

Pošto zvučni talasi imaju tri pravca polarizacije u formuli 3.3 se pojavljuje član $3/2$. Rešavajući jednačinu 3.3 dobijemo slobodnu energiju čvrstog tela u obliku:

$$F = N\varepsilon_0 - V\frac{\pi^2 (kT)^4}{30(\hbar\bar{u})^3} \,. \qquad 3.5$$

Njegova energija je:
$$E = N\varepsilon_0 + V\frac{\pi^2 (kT)^4}{10(\hbar\bar{u})^3} \,, \qquad 3.6$$

i specifična toplota:
$$C = \frac{2\pi^2 k}{5(\hbar\bar{u})^3}(kT)^3 V \,. \qquad 3.7$$

Iz formule 3.7 se da zaključiti da specifična toplote čvrstog tela je proporcionalna trećem stepenu temperature (Debaj 1912).

b) <u>Visoke temperature</u>

Ovde je $kT \gg \frac{\hbar u}{a}$ pa je:
$$1 - e^{-\frac{\hbar\omega_\alpha}{kT}} \approx \frac{\hbar\omega_\alpha}{kT} \,,$$

i slobodna energija je:
$$F = N\varepsilon_0 + kT\sum_\alpha \ln\frac{\hbar\omega_\alpha}{kT} \,. \qquad 3.8$$

Uvodi se „srednja geometriska frekvenca:"
$$\ln\bar{\omega} = \frac{1}{3N\nu}\sum_\alpha \ln\omega_\alpha \,,$$

pa je:
$$F = N\varepsilon_0 - 3N\nu kT\ln kT + 3N\nu kT\ln\hbar\bar{\omega} \,, \qquad 3.9.$$

gde je: $\bar{\omega} = \bar{\omega}\left(\frac{V}{N}\right)$, a energija tela je:
$$E = F - T\frac{\partial F}{\partial T} = N\varepsilon_0 + 3N\nu kT \,. \qquad 3.10$$

Zza specifičnu toplotu na visokim temperaturama imamo:
$$C = N_C = 3N\nu k = const \,, \qquad 3.11$$

(gde je $C=3\nu k$ specifična toplota jednog molekula).

Prema tome na dovoljno visokim temperaturama specifična toplota čvrstog tela je konstantna veličina, pri čemu zavisi samo od broja atoma u telu (N). Ovde je bitno da su pobudjene sve $3N\nu$ oscilacije.

c) Interpolaciona Debajeva formula

Videlo se da u oblasti niskih i visokih temperatura je moguće dobiti termodinamičke veličine čvrstog tela. Ali u oblasti temperatura izmedju tih graničnih slučajeva nemoguće je ovakvo izračunavanje pošto sumiranje u 3.1 ~~bitno~~ zavisi od frekvencija po celom spektoru oscilacija čvrstog tela. Zbog toga se traži neka interpolaciona formula koja bi zadovoljavala oba granična slučaja. Da bi se ddobila takva formula prirodno je da se polazi od formule 3.4 (važi za niske temperature). Pri ovome, spektar koji počinje od $\omega=0$ lomi se kod neke konačne frekvencije $\omega=\omega_m$ koja se odredjuje po formuli: $\omega_m=\bar{u}\left(\frac{6\pi^2 N\nu}{V}\right)^{1/3}$, 3.12

i raspodela frekvencija kod ovog modela je data sa:

$$9N\nu\frac{\omega^2 d\omega}{\omega_m^3}\left(\omega\leqslant\omega_m\right). \qquad 3.13$$

Ako još uvedemo tkv. Debejevu (karakteristična) temperaturu relacijom ($k\theta=h\omega_m$; θ- frekvencija gustine tela)., izvršimo integriranje uvodjenjem Debajeve funkcije:

$$D(x)=\frac{3}{x^3}\int_0^x\frac{z^3dz}{e^z-1}, \qquad 3.14$$

formula 3.1 (prvo se prelazi od sume na integral). Za slobodnu energiju čvrstog tela postaje:

$$F=N\varepsilon_0+N\nu kT\left[3\ln\left(1-e^{-\theta/T}\right)-D\left(\frac{\theta}{T}\right)\right]. \qquad 3.15$$

Energija je:

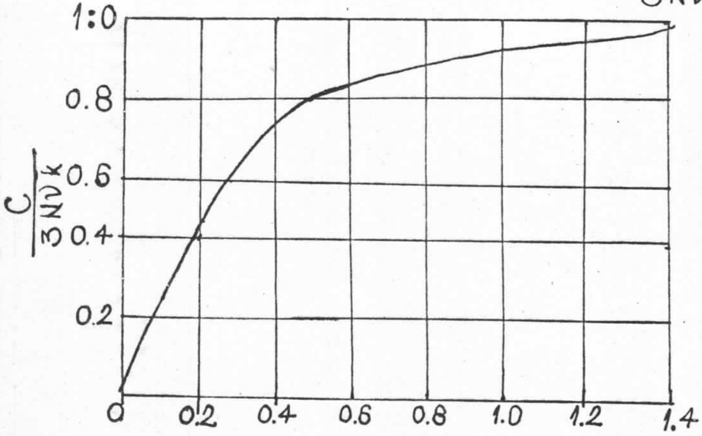
$$E=N\varepsilon_0+3N\nu kTD\left(\frac{\theta}{T}\right) \qquad 3.16$$

i specifična toplota je:

$$C=3N\nu k\left\{D\left(\frac{\theta}{T}\right)-\frac{\theta}{T}D'\left(\frac{\theta}{T}\right)\right\}. \qquad 3.17$$

Zadnje formule tj. 3.15,16 i 17 predstavljaju interpolacione formule termodinamičkih veličina čvrstog tela.

Grafički se može prikazati zavisnost $\frac{C}{3N\nu k}$ od $\frac{T}{\theta}$.



Sl. 1

1) Za $T \ll \theta$ (niske temperature)

$\frac{\theta}{T}$ je veći i: $D(x) \approx \frac{\pi^4}{5x^3}$

$$C = \frac{12 N\nu k \pi^4}{5} \left(\frac{T}{\theta}\right)^3$$

poklapa se sa 3.7.

2) $T \gg \theta$ (visoke temperature)

$x \ll 1,\ D(x) \approx 1;\ C = 3N\nu k$

Specifična toplota može se smatrati da je konstantna za $T \gg \frac{\theta}{4}$ i proporcionalna T^3 za $T \ll \frac{\theta}{4}$, i ona je prema Debaju univerzalna funkcija količnika $\frac{\theta}{T}$. Za složene strukture ova formula je neprimenljiva.

II glava

Fononi u polubeskonačnim strukturama

U prvoj glavi razmatrao se kristal sa idealnom strukturom (beskonačni kristal) koji je translaciono ~~invarijantan u sve tri dimenzije~~. U praksi svaki kristal sadrži u sebi neke primese i defekte, pa dolazi do narušenja translacione simetrije kristala. U polubeskonačnom kristalu mesto narušenja strukture je granica kristala (granična površina). Prema tome kod polu beskonačnog kristala uzima se u obzir postojanje jedne granične površine. Postojanje deformacija dovodi obično ~~xxxx~~ do stvaranja novog tipa eksitacija lokalizovanih oko mesta deformacija. Osim eksitacija koje se prostiru po celoj zapremini (kod idealnog kristala) kod polubeskonačnog kristala pojavljuju se i eksitacije koje su lokalizovane oko granične površine. Prva vrsta stanja zove se zapreminski, a druga površinski fononi.

Zapreminska i površinska fononska stanja su poznati pod imenom Relejevih talasa.

4. Jednodimenzionalna struktura

Zbog matematičke jasnoće mi ćemo prvo analizirati zapreminska i površinska stanja u jednoj dimenziji. Radi lakšeg računa posmatraćemo lanac proste strukture u aproksimaciji najbližih suseda ograničen sa jedne strane.

$$\underbrace{0 \quad 1}_{a} \quad 2 \quad 3 \; - - - - - - \; N$$

Diferencijalne jednačine kretanja ovakvog niza atoma su:

$$\begin{aligned} &1.\ M\ddot{\xi}_0 = \alpha(\xi_1 - \xi_0) - (\alpha - \alpha')\xi_0 && \text{za } n = 0 \\ &2.\ M\ddot{\xi}_n = \alpha(\xi_{n+1} - \xi_n) - \alpha(\xi_n - \xi_{n-1}), && n > 0 \end{aligned} \qquad 4.1$$

gde je ξ_n - elongacija n - tog atoma; α - koeficijent proporcionalnosti u izrazu za silu interakcije izmedju dva susedna atoma (tj. konstanta sile), α' - popravka za koeficijent za atom koji je na "površini " zbog drugačije vezanosti u kristalu, M - masa atoma.

Rešenje jednačine 2 sistema 4.1 traži se u obliku:

$$\xi_n = X^n e^{-i\omega t}. \qquad 4.2$$

Opšte rešenje navedenog sistema jednačina je:

$$\xi_n = \left(C_1 e^{i\beta n a} + C_2 e^{-i\beta n a}\right) e^{-i\omega t} \equiv A_n \sin(n\beta a + \gamma_n)\, e^{-i\omega t}, \qquad 4.3$$

uz uslov da je zakon disperzije oblika:

$$\omega = \frac{2\alpha}{M}(1 - \cos\beta a). \qquad 4.4$$

Rešenje 4.3 treba da zadovoljava i jednačinu 1 sistema 4.1 , a to će biti tek onda kada u lineralnoj kombinaciji

$$\xi_n = \left\{A_1 \sin(n\beta a + \gamma_1) + A_2 \sin\left[(n+1)\beta a + \gamma_2\right]\right\} e^{-i\omega t}, \qquad 4.5$$

stavimo $A_2 = bA_1 = bA$ i $\gamma_1 = \gamma_2 = 0$ pa je: $b = -\frac{\alpha}{\alpha'}$.

Prema tome rešenje koje zadovoljava i jednačinu 1 i 2 sistema 4.1 ima oblik:

$$\xi = A\left[\sin n\beta a - \frac{\alpha}{\alpha'}\sin(n-1)\beta a\right]e^{-i\omega t}. \qquad 4.6$$

Najopštije kretanje atoma opisano je funkcijom:

$$\xi_{1(n)} = \sum_{\beta}\left[A_\beta f(\beta,n)e^{-i\omega t} + A^*_\beta f(\beta,n)e^{i\omega t}\right], \qquad 4.7$$

gde je:

$$f(\beta,n) = \sin\beta n a - \frac{\alpha}{\alpha'}\sin(n+1)\beta a.$$

Sada se dijagonalizuje hamiltonijan fononskog stanja oblika:

$$H = T + \Phi = \frac{M}{2}\sum_{n=0}^{N}\dot{\xi}_n^2 + \frac{\alpha}{2}\sum_{n=0}^{N}\left(\xi_n - \xi_{n-1}\right)^2, \qquad 4.8$$

smenom 4.7. Ako se uvedu oznake:

$$a_\beta = A_\beta\sqrt{N}\left|1 - \frac{\alpha}{\alpha'}e^{i\beta}\right|\sqrt{M\omega}\,e^{-i\omega t}\frac{1}{\sqrt{\hbar}},$$
$$a^*_\beta = A^*_\beta\sqrt{N}\left|1 - \frac{\alpha}{\alpha'}e^{i\beta}\right|\sqrt{M\omega}\,e^{i\omega t}\frac{1}{\sqrt{\hbar}}, \qquad 4.9$$

izrazi za kinetičku i potencijalnu energiju sistema su:

$$T = \frac{1}{4}\sum_\beta\hbar\omega_\beta\left(a_\beta a^*_\beta + a^*_\beta a_\beta - a_\beta a_\beta - a^*_\beta a^*_\beta\right),$$
$$\Phi = \frac{1}{4}\sum_\beta\hbar\omega_\beta\left(a_\beta a^*_\beta + a^*_\beta a_\beta + a_\beta a_\beta + a^*_\beta a^*_\beta\right),$$

a hamiltonijan sistema postaje:

$$H = \frac{1}{2}\sum_\beta\hbar\omega_\beta\left(a_\beta a^*_\beta + a^*_\beta a_\beta\right)$$

Prelazeći na Boze operatore tj. zamenjujući brojeve a_β i a^*_β operatorima a_β i a^+_β sa komutacionim relacijama:

$$\left[a_{\beta'}, a^+_\beta\right] = \delta_{\beta\beta'}\ ; \ \left[a_{\beta'}\, a_\beta\right] = \left[a^+_{\beta'}\, a^+_\beta\right] = 0 \qquad 4.10$$

dobijamo:

$$\hat{H} = \sum_\beta\hbar\omega_\beta\left(\frac{1}{2} + a^+_\beta a_\beta\right), \qquad 4.11$$

gde $a^+_\beta a_\beta$ predstavlja operator broja fonona u stanju β . Najopštiji pomeraj atoma u operatorskom vidu ima oblik:

$$\xi_{1(n)} = \sum_\beta C_\beta f(n,\beta)\left[a_\beta + a^+_\beta\right], \qquad 4.12$$

gde konstantu C odredjujemo iz uslova normiranja hamiltonijana 4.8

$$H = \sum_\beta M C^2_\beta\left|1 - \frac{\alpha}{\alpha'}e^{i\beta}\right|\omega_\beta N\frac{1}{\hbar}\left(\frac{1}{2} + a^+_\beta a_\beta\right)\hbar\omega_\beta, \qquad 4.13$$

pa je:

$$C_\beta = \sqrt{\frac{\hbar}{M\omega_\beta N\left(1-2\frac{\alpha}{\alpha'}\cos\beta+\frac{\alpha^2}{\alpha'^2}\right)}} \quad . \qquad 4.13'$$

Znači, pomeraj atoma ima konačni oblik:

$$\hat{\xi}_n(n) = \sum_\beta \sqrt{\frac{\hbar}{M\omega_\beta N\left(1-2\frac{\alpha}{\alpha'}\cos\beta+\frac{\alpha^2}{\alpha'^2}\right)}}\, f(n,\beta)\left[a_\beta + a^+_\beta\right]. \qquad 4.14$$

Analizirajući izraz 4.14 vidi se da je ova amplituda pomeraja periodična funkcija po čitavaom kristalu. Fononi ovakvog tima zovu se zapreminski fononi.

Lako se vidi da sistem jednačina 4.1 osim periodičnog rešenja 4.14 ima i rešenje oblika:

$$\xi_n = C_\rho e^{-\rho n a - i\omega t} , \qquad 4.15$$

pri čemu je frenkvencija:

$$\omega = 2\sqrt{\frac{\alpha}{M}}\, \operatorname{sh}\frac{\rho a}{2} \qquad 4.16$$

i

$$e^{\rho a} = \frac{\alpha'}{\alpha} .$$

Rešenje ima fizički smisao ako je $\rho > 0$ tj. ako je $\alpha' > \alpha$. 4.17

Tada je ovo rešenje lokalizovano oko površine i zvaćemo ga površinsko stanje fonona.

Najopštije kretanje atoma za ovaj slučaj ekscitiranja opisano je sa:

$$\xi_2(n) = C_\rho e^{-\rho n a} e^{-i\omega t} + C^*_\rho e^{-\rho n a} e^{i\omega t} . \qquad 4.18$$

Dijagonalizujmo hamiltonijal sistema 4.8 funkcijom 4.18 uvodeći veličine:

$$a_\rho = \frac{\sqrt{2M\omega}\, C_\rho \alpha' e^{-i\omega t}}{\sqrt{\hbar(\alpha'^2-\alpha^2)}} ,$$

$$a^*_\rho = \frac{\sqrt{2M\omega}\, C^*_\rho e^{i\omega t}}{\sqrt{\hbar(\alpha'^2-\alpha^2)}} , \qquad 4.19$$

Izrazi za kinetičku i potencionalnu energiju ~~xxx~~ postaju:

$$T = \frac{1}{4}\omega\hbar\left(a_\rho a^*_\rho + a^*_\rho a_\rho - a_\rho a_\rho - a^*_\rho a^*_\rho\right)$$

$$\Phi = U = \frac{1}{4}\omega\hbar\left(a_\rho a^*_\rho + a^*_\rho a_\rho + a_\rho a_\rho + a^*_\rho a^*_\rho\right),$$

a hamiltonijan seštema ima oblik:

$$H = \frac{1}{2}\hbar\omega\left(a_\rho a^*_\rho + a^*_\rho a_\rho\right) . \qquad 4.20$$

Prelaz na kvantnu mehaniku vrši se prelazom na Boze operatore pa je:

$$H = \hbar\omega_\rho\left(\frac{1}{2} + a^+_\rho a_\rho\right). \qquad 4.21$$

Pomeraj atoma 4.18 ima oblik:

$$\xi_2(n) = B_\rho e^{-na\rho}\left[a_\rho + a_\rho^+\right],$$

gde se konstanta B_ρ odredjuje iz uslova normiranja hamiltonijana

$$H = \frac{2M\omega_\rho B_\rho^2}{(1-e^{-2\rho a})\hbar}\left(\frac{1}{2} + a_\rho^+ a_\rho\right)\hbar\omega_\rho ,$$

tj.

$$B_\rho = \sqrt{\frac{\hbar(1-e^{-2\rho a})}{2M\omega_\rho}}\ , \qquad 4.22$$

pa pomeraj ima konačnu formulu:

$$\xi_2(n) = \sqrt{\frac{\hbar(1-e^{-2\rho a})}{2M\omega_\rho}}\, e^{-na\rho}\left[a_\rho + a_\rho^+\right]. \qquad 4.23$$

aAmplituda 4.23 eksponencijalno opadada sa porastom dubine.

5. Trodimenzionalne strukture

Za trodimenzionalni polubeskonačni kristal predpostavićemo da je translaciona simetrija narušena duž ose Z, a duž osa X i Y narušenje simetrije nema. I ovde se posmatra kristal proste kubne strukture sa jednim atomom po elementarnoj ćeliji.

Klasični hamiltonijan sistema je:

$$H = \frac{1}{2}\sum_{\vec{n},i}\left\{M\left(\dot{\xi}^i_{\vec{n}}\right)^2 + \sum_{\vec{m},i'}\lambda^{ii'}(\vec{n}-\vec{m})\,\xi^i_{\vec{n}}\,\xi^{i'}_{\vec{m}}\right\} \qquad 5.1$$

gde je $\vec{n} \equiv (n_x n_y n_z)$, $-\frac{N_x}{2} \leq n_x \leq \frac{N_x}{2}$, $-\frac{N_y}{2} \leq n_y \leq \frac{N_y}{2}$, $n_z = 0, 1, 2, \ldots N_z$

M - masa atoma, $\xi^i_{\vec{n}}$ - ta komponenta vektora pomeraja $\vec{n}$ - tog atoma u odnosu na njegov ravnotežni položaj, $\lambda^{ii'}(\vec{n}-\vec{m})$ koeficijent koji zavisi samo od rastojanja izmedju $\vec{n}$ - tog i $\vec{m}$ - tog atoma.

Interakcije koje ovde figurišu pišu se u aproksimaciji najbližih suseda pri čemu se razlikuju slučajevi:

a) atom za koga se piše jednačina kretanja nalazi se u unutrašnjosti kristala $n_z > 0$

b) taj atom nalazi se na površini kristala ($n_z \geq 0$). $n_z = 0$

Kad je $n_z > 0$ (slučaj a) komponentne jednačine kretanja su:

$$1.\ M\ddot{\xi}^x_{\vec{n}} + \lambda_0\xi^x_{\vec{n}} + \lambda\left(\xi^x_{\vec{n}-\vec{a}_1} + \xi^x_{\vec{n}+\vec{a}_1} + \xi^x_{\vec{n}-\vec{a}_2} + \xi^x_{\vec{n}+\vec{a}_2} + \xi^x_{\vec{n}-\vec{a}_3} + \xi^x_{\vec{n}+\vec{a}_3}\right) + \lambda_0^T\left(\xi^y_{\vec{n}} + \xi^z_{\vec{n}}\right) =$$

$$2.\ M\ddot{\xi}^y_{\vec{n}} + \lambda_0\xi^y_{\vec{n}} + \lambda\left(\xi^y_{\vec{n}-\vec{a}_1} + \xi^y_{\vec{n}+\vec{a}_1} + \xi^y_{\vec{n}-\vec{a}_2} + \xi^y_{\vec{n}+\vec{a}_2} + \xi^y_{\vec{n}-\vec{a}_3} + \xi^y_{\vec{n}+\vec{a}_3}\right) + \lambda_0\left(\xi^x_{\vec{n}} + \xi^z_{\vec{n}}\right)$$

$$3.\ M\ddot{\xi}^z_{\vec{n}}+\lambda_0\xi^z_{\vec{n}}+\lambda\left(\xi^z_{\vec{n}-\vec{a}_1}+\xi^z_{\vec{n}+\vec{a}_1}+\xi^z_{\vec{n}-\vec{a}_2}+\xi^z_{\vec{n}+\vec{a}_2}+\xi^z_{\vec{n}-\vec{a}_3}+\xi^z_{\vec{n}+\vec{a}_3}\right)+\lambda^T_0\left(\xi^x_{\vec{n}}+\xi^y_{\vec{n}}\right)=0 \quad 5.2,$$

pri čemu su torzioni koeficijenti za dva susedna atoma jednaki nuli, tj. $\lambda^{xy}=\lambda^{yx}=\lambda^{xz}=\lambda^{zx}=\lambda^{yz}=\lambda^{zy}$, jer su male veličine trećeg reda u odnosu na koeficijente istezanja za atom oko ravnotežnog položaja.

Uvedimo oznake:

$$\lambda_{01}=\lambda^{xx}_0 \qquad \lambda^1_0=\lambda^{xy}_0=\lambda^{yx}_0 \qquad \lambda_1=\lambda^{xx}$$
$$\lambda_{02}=\lambda^{yy}_0 \qquad \lambda^2_0=\lambda^{xz}_0=\lambda^{zx}_0 \qquad \lambda_2=\lambda^{yy}$$
$$\lambda_{03}=\lambda^{zz}_0 \qquad \lambda^3_0=\lambda^{yz}_0=\lambda^{zy}_0 \qquad \lambda_3=\lambda^{zz},$$

gde su λ_{0j} (j= 1,2,3) koeficijenti istezanja za sopstveni atom oko ravnotežnog položaja, λ^j_0 (j = 1,2,3) koeficijenti torzije za sopstveni atom, λ_j (j = 1,2,3) koeficijent istezanja (proporcionalnosti) za silu interakcije dva susedna atoma. Očigledno je da su sledeći koeficijenti medjusobom jednaki:

$$\lambda_{01}=\lambda_{02}=\lambda_{03}=\lambda_0$$
$$\lambda^1_0=\lambda^2_0=\lambda_{03}=\lambda^T_0$$
$$\lambda_1=\lambda_2=\lambda_3=\lambda\,.$$

Za slučaj $n_z=0$ (b-slučaj) površinski atomi - komponentni sistem jednačina kretanja je oblika:

$$1.\ M\ddot{\xi}^x_{\vec{n}}+(\lambda_0-\lambda'_0)\xi^x_{\vec{n}}+\lambda\left[\xi^x_{\vec{n}-\vec{a}_1}+\xi^x_{\vec{n}+\vec{a}_1}+\xi^x_{\vec{n}-\vec{a}_2}+\xi^x_{\vec{n}+\vec{a}_2}+\xi^x_{\vec{n}-\vec{a}_3}+\xi^x_{\vec{n}+\vec{a}_3}\right)+\lambda^T_0\left(\xi^y_{\vec{n}}+\xi^z_{\vec{n}}\right)=0$$
$$2.\ M\ddot{\xi}^y_{\vec{n}}+(\lambda_0-\lambda'_0)\xi^y_{\vec{n}}+\lambda\left(\xi^y_{\vec{n}-\vec{a}_1}+\xi^y_{\vec{n}+\vec{a}_1}+\xi^y_{\vec{n}-\vec{a}_2}+\xi^y_{\vec{n}+\vec{a}_2}+\xi^y_{\vec{n}-\vec{a}_3}+\xi^y_{\vec{n}+\vec{a}_3}\right)+\lambda^T_0\left(\xi^x_{\vec{n}}+\xi^z_{\vec{n}}\right)=0$$
$$3.\ M\ddot{\xi}^z_{\vec{n}}+(\lambda_0+\lambda'_0)\xi^z_{\vec{n}}+\lambda\left(\xi^z_{\vec{n}-\vec{a}_1}+\xi^z_{\vec{n}+\vec{a}_1}+\xi^z_{\vec{n}-\vec{a}_2}+\xi^z_{\vec{n}+\vec{a}_2}+\xi^z_{\vec{n}-\vec{a}_3}+\xi^z_{\vec{n}+\vec{a}_3}\right)+\lambda^T_0\left(\xi^x_{\vec{n}}+\xi^y_{\vec{n}}\right)=0, \quad 5.3$$

Pošto su površinski atomi drugačije vezani u odnosu na zapreminske to se koeficijenti istezanja za sopstveni atom razlikuju za λ'_0 u odnosu na koeficijent istezanja atoma u zapremini. To znači da ćemo promenu koeficijenata λ_0 i λ^T_0

zanemariti kao male veličine drugog reda u odnosu na λ_0 , odnosno kao male veličine prvog reda u odnosu na λ_0' .

Rešenje sistema 5.2 tražimo (po analogiji sa problemom u jednoj dimenziji) u obliku:

$$\xi^{j}_{\vec{n}} = A_j e^{i(n_x k_x + n_y k_y)a}\left[\sin n_z k_z a + b \sin (n_z+1) k_z a\right] e^{-i\omega t}, \quad 5.4$$

gde je j x,y,z. Konstantu b odredit ćemo iz uslova da izraz 5.4 bude istovremeno i rešenje sistema 5.3. U tom slučaju dobija se sistem linearnih jednačina po nepoznatim amplitudama A_x A_y A_z pa sistem 5.2 prelazi u oblik

$$\begin{aligned}
&\left[-M\omega^2 + \lambda_0 + 2\lambda(\cos a k_x + \cos a k_y + \cos a k_z)\right]A_x + \lambda_0^T A_y + \lambda_0^T A_z = 0\\
&\lambda_0^T A_x + \left[-M\omega^2 + \lambda_0 + 2\lambda(\cos a k_x + \cos a k_y + \cos a k_z)\right]A_y + \lambda_0^T A_z = 0 \quad 5.5\\
&\lambda_0^T A_x + \lambda_0^T A_z + \left[-M\omega^2 + \lambda_0 + 2\lambda(\cos a k_x + \cos a k_y + \cos a k_z)\right]A_z = 0,
\end{aligned}$$

a sistem 5.3 prelazi u oblik:

$$\begin{aligned}
&\left[-M\omega^2 + \lambda_0 - \lambda_0' + \lambda\left(2\cos a k_x + 2\cos a k_y + 2\cos a k_z + \frac{1}{b}\right)\right]A_x + \lambda_0^T(A_y + A_z) = 0\\
&\lambda_0^T A_x + \left[-M\omega^2 + \lambda_0 - \lambda_0' + \lambda\left(2\cos a k_x + 2\cos a k_y + 2\cos a k_z + \frac{1}{b}\right)\right]A_y + \lambda_0^T A_z = 0\\
&\lambda_0^T A_x + \lambda_0^T A_y + \left[-M\omega^2 + \lambda_0 - \lambda_0' + \lambda\left(2\cos a k_x + 2\cos a k_y + 2\cos a k_z + \frac{1}{b}\right)\right]A_z = 0.
\end{aligned} \quad 5.6$$

Pošto su ovo sistemi homogenih linearnih jednačina, netrivijalna rešenja po $A_x, A_y,$ A_z postaje ako su determinante jednake nuli tj.

$$\begin{vmatrix}
-M\omega^2 + \lambda_0 + 2\lambda(\cos a k_x + \cos a k_y + \cos a k_z) & \lambda_0^T & \lambda_0^T\\
\lambda_0^T & -M\omega^2 + \lambda_0 + 2\lambda(\cos a k_x + \cos a k_y + \cos a k_z) & \lambda_0^T\\
\lambda_0^T & \lambda_0^T & -M\omega^2 + \lambda_0 + 2\lambda(\cos a k_x + \cos a k_y + \cos a k_z)
\end{vmatrix} = 0 \quad 5.7$$

i

$$\begin{vmatrix}
-M\omega^2 + \lambda_0 - \lambda_0' + \lambda\left(2\cos a k_x + 2\cos a k_y + 2\cos a k_z + \frac{1}{b}\right) & \lambda_0^T & \lambda_0^T\\
\lambda_0^T & -M\omega^2 + \lambda_0 - \lambda_0' + \lambda\left(2\cos a k_x + 2\cos a k_y + 2\cos a k_z + \frac{1}{b}\right) & \lambda_0^T\\
\lambda_0^T & \lambda_0^T & -M\omega^2 + \lambda_0 - \lambda_0' + \lambda\left(2\cos a k_x + 2\cos a k_y + 2\cos a k_z + \frac{1}{b}\right)
\end{vmatrix} = 0 \quad 5.8$$

Pošto rešenje 5.4 mora da zadovoljava jednačine 5.2 i 5.3 sledi jednakost zakona disperzije navedenog sistema jednačina, a to uslovljava jednakost determinanata 5.7 i 5.8. Iz jednakosti dobijamo da je $b=\frac{\lambda}{\lambda'_0}$. Determinante 5.7 i 5.8 su trećeg reda i zato imamo tri zakona disperzije.

Proizvoljni realni pomeraj atoma piše se kao:

$$\vec{\xi}_{\vec{n}}=\sum_{\ell,\vec{k}}\vec{e}_\ell(\vec{k})f(n_z k_z)\left[A(\vec{k})e^{i(n_x k_x+n_y k_y)a}e^{-i\omega_\ell(\vec{k})t}+A^*_{(\vec{k})}e^{-i(n_x k_x+n_y k_y)a}e^{i\omega_\ell(\vec{k})t}\right]. \qquad 5.9$$

Uvodeći kompleksne veličine realicijama

$$a_{\vec{k},\ell}=A(\vec{k})\sqrt{N_x N_y N_z M\omega_\ell(\vec{k})\left|1+\frac{\lambda}{\lambda'_0}e^{ik_z a}\right|}\,e^{-i\omega_\ell(\vec{k})t}\frac{1}{\sqrt{\hbar}}$$

$$a^*_{\vec{k},\ell}=\overset{*}{A}(\vec{k})\sqrt{N_x N_y N_z M\omega_\ell(\vec{k})\left|1+\frac{\lambda}{\lambda'_0}e^{ik_z a}\right|}\,e^{i\omega_\ell(\vec{k})t}\frac{1}{\sqrt{\hbar}},$$

izraz 5.9 prelazi u

$$\vec{\xi}_{\vec{n}}=\sum_{\ell,\vec{k}}\sqrt{\frac{\hbar}{N_x N_y N_z\left|1+\frac{\lambda}{\lambda'_0}e^{ik_z a}\right|M\omega_\ell(\vec{k})}}\,\vec{e}_\ell(\vec{k})f(n_z,k_z)\left[a_{\ell,\vec{k}}e^{i(n_x k_x+n_y k_y)a}+a^*_{\ell,\vec{k}}e^{-i(n_x k_x+n_y k_y)a}\right]. \qquad 5.10$$

Hamiltonijan sistema 5.1 istovremeno dijagonalizovan sa ovim funkcijama je oblika:

$$H=\frac{1}{2}\sum_{\ell,\vec{k}}\hbar\,\omega_\ell(\vec{k})\left(a_{\vec{k},\ell}a^*_{\vec{k},\ell}+a_{\vec{k},\ell}a^*_{\vec{k},\ell}\right). \qquad 5.11$$

Prelaz na kvantnu mehaniku ostvaruje se preko Boze operatora $a_{\vec{k},\ell};a^+_{\vec{k},\ell}$ sa komutacionim ~~relacijama~~ relacijama:

$$[a_{\vec{k},\ell},a^+_{\vec{k}',\ell'}]=\delta_{\vec{k}'\vec{k}}\,\delta_{\ell'\ell}\,;\;[a_{\vec{k}',\ell'},a_{\vec{k},\ell}]=[a^+_{\vec{k}',\ell'},a^+_{\vec{k},\ell}]=0, \qquad 5.12$$

pa je:

$$\vec{\xi}_{\vec{n}}=\sum_{\vec{k},\ell}\sqrt{\frac{\hbar}{N_x N_y N_z\left|1+\frac{\lambda}{\lambda'_0}e^{ik_z a}\right|\omega_\ell(\vec{k})M}}\,\vec{e}_\ell(\vec{k})f(n_z k_z)\times\left[a_{\vec{k},\ell}e^{i(n_x k_x+n_y k_y)a}+a^*_{\vec{k},\ell}e^{-i(n_x k_x+n_y k_y)a}\right] \qquad 5.13$$

i

$$H=\sum_{\vec{k},\ell}\hbar\,\omega_\ell(\vec{k})\left(\frac{1}{2}+a^+_{\vec{k},\ell}a_{\vec{k},\ell}\right). \qquad 5.14$$

Izraz 5.13 daje nam amplitudu pomeraja periodične funkcije po zapremini kristala (zapreminski fononi). Osim ovog rešenja 5.13 postoji još jedno rešenje koje zadovoljava sistem jednačina 5.2 koje se traži u obliku

$$\vec{\xi}^{\,j}_{\vec{n}}=A_j e^{i(n_x k_x+n_y k_y)a}e^{-\rho n_z a}e^{-i\omega t}\;;\;\rho>0, \qquad 5.15$$

gde se ρ odredjuje na isti način kao kod zapreminskih fonona tj. iz uslova jednakosti determinanata:

$$\begin{vmatrix} -M\omega^2+\lambda_0+2\lambda(\cos ak_x+\cos ak_y+ch\,\rho a) & \lambda_0^T & \lambda_0^T \\ \lambda_0^T & -M\omega^2+\lambda_0+2\lambda(\cos ak_x+\cos ak_y+ch\,\rho a) & \lambda_0^T \\ \lambda_0^T & \lambda_0^T & -M\omega^2+\lambda_0+2\lambda(\cos ak_x+\cos ak_y+ch\,\rho a) \end{vmatrix}=0 \quad 5.16$$

i

$$\begin{vmatrix} -M\omega^2+\lambda_0-\lambda_0'+\lambda(2\cos ak_x+2\cos ak_y+e^{-\rho a}) & \lambda_0^T & \lambda_0^T \\ \lambda_0^T & -M\omega^2+\lambda_0-\lambda_0'+\lambda(2\cos ak_x+2\cos ak_y+e^{-\rho a}) & \lambda_0^T \\ \lambda_0^T & \lambda_0^T & -M\omega^2+\lambda_0-\lambda_0'+\lambda(2\cos ak_x+2\cos ak_y+e^{-\rho a}) \end{vmatrix}=0 \quad 5.17$$

Odavde nalazimo:

$$e^{-\rho a}=-\frac{\lambda}{\lambda_0'}\,. \qquad 5.18$$

Uslov egzistencije fonona ovog tipa je $\left|\frac{\lambda}{\lambda_0'}\right|\ll 1$.

Proizvoljni realni fononski pomeraj oblika je:

$$\vec{\xi}_{\vec{n}}=\sum_{k_xk_y\ell}\vec{e}_\ell(k_xk_y i\rho)e^{-\rho n_z a}\Big[A_{(k_xk_y i\rho)}\,e^{i(n_xk_x+n_yk_y)a-i\omega_\ell(k_x,k_y,i,\rho)t}+A^*_{(k_xk_y i\rho)}\times$$
$$\times\, e^{-i(n_xk_x+n_yk_y)a+i\omega_\ell(k_x,k_y,i,\rho)t}\Big], \qquad 5.19$$

uvodeći kompleksne veličine relacijama:

$$a_{k_xk_y i\rho,\ell}=A_{(k_xk_y i\rho)}\,e^{-i\omega_\ell(k_xk_y i\rho)t}\frac{\sqrt{N_xN_y 2M\omega_\ell(k_xk_y i\rho)}}{\sqrt{\hbar(1-e^{-2\rho a})}}$$

$$a^*_{k_xk_y i\rho,\ell}=A^*_{(k_xk_y i\rho)}\,e^{i\omega_\ell(k_xk_y i\rho)t}\frac{\sqrt{N_xN_y 2M\omega_\ell(k_xk_y i\rho)}}{\sqrt{\hbar(1-e^{-2\rho a})}},$$

i prelazeći na kvantnu mehaniku pomoću Boze operatora koji zadovoljavaju jednačinu 5.12 fononski poremećaj i hamiltonijan sestema su oblika:

$$\vec{\xi}_{\vec{n}}=\sum_{k_xk_y,\ell}\sqrt{\frac{\hbar(1-e^{-2\rho a})}{N_xN_yM\omega_\ell(k_xk_y i\rho)}}\,\vec{e}_\ell(k_xk_y i\rho)e^{-\rho n_z a}\Big[a_{k_xk_y i\rho,\ell}\,e^{i(n_xk_x+n_yk_y)a}+$$
$$+\,a^+_{k_xk_y i\rho,\ell}\,e^{-i(n_xk_x+n_yk_y)a}\Big], \qquad 5.20$$

$$H=\sum_{k_xk_y,\ell}\hbar\omega_\ell(k_xk_y i\rho)\left(\frac{1}{2}+a^+_{k_xk_y i\rho,\ell}\,a_{k_xk_y i\rho,\ell}\right). \qquad 5.21$$

Amplituda pomeraja 5.20 eksponencijalno opada sa porastom dubine u kristalu (površinska ~~xxxxx~~ stanja). Napomena: analogno ovom prethodnom izvodjenju može se sve pokazati i za dvodimenzionalnu strukturu.

III glava

Fononi u tankim filmovima

6. Fononi u jednodimenzionalnoj strukturi

Posmatra se lanac atoma udaljenih izmedju sebe za dužinu " a ". Za razliku od slučaja razmatranog u paragrafu 4 i 5 broj atóma u ovom lancu N nije dovoljno veliki, tj. ne možemo zanemariti jedinicu u odnosu na N . Hamiltonijan ovakve strukture piše se u sledećem obliku:

$$H = T + U = \sum_{n=0}^{N} \frac{M}{2}\dot{\xi}_n^2 + \sum_{n=1}^{N-1} \frac{\alpha}{4}\left[(\xi_n - \xi_{n+1})^2 + (\xi_n - \xi_{n-1})^2\right] + \frac{\alpha}{4}(\xi_0 - \xi_1)^2 + \frac{1}{2}(\alpha - \alpha')\xi_0^2 +$$
$$+ \frac{1}{2}(\alpha - \alpha')\xi_N^2 + \frac{\alpha}{4}(\xi_N - \xi_{N-1})^2, \qquad 6.1$$

a jednačine kretanja glase:

$$\begin{aligned} &1.\ M\ddot{\xi}_n = \alpha(\xi_{n+1} + \xi_{n-1} - 2\xi_n) && 1 \leq n \leq N-1 \\ &2.\ M\ddot{\xi}_0 = \alpha(\xi_1 - \xi_{-1} - 2\xi_0) + \alpha'\xi_0 - \alpha\xi_{-1} && n = 0 \qquad 6.2 \\ &3.\ M\ddot{\xi}_N = \alpha(\xi_{N+1} + \xi_{N-1} - 2\xi_N) + \alpha'\xi_N - \alpha\xi_{N+1} && n = N . \end{aligned}$$

Kada se uporedi ovaj sistem jednačina sa 4.1 sistemom vidi se da on sadrži samo još jednu jednačinu više, tj. ovde imamo dva granična uslova. U slučaju velikih N nema dva granična uslova već samo jedan, jer se za jako veliko N može se uzeti da je:

$$N + 1 \approx N - 1 .$$

Rešenje se traži u obliku:

$$\xi_n = \sum_{\nu} \left\{A_\nu \cos ak(n+\nu) + B_\nu \sin ak(n+\nu)\right\} e^{i\omega_k t} . \qquad 6.3$$

Rešavajuci jednačinu 1 sistema 6.2 uz primenu rešenja 6.3 dobijamo izraz:

$$\omega_k = 2\sqrt{\frac{\alpha}{M}} \sin\frac{ak}{2} . \qquad 6.4$$

Treba napomenuti da je:

$$K = \frac{\pi}{Na} m , \qquad m \text{ - ceo broj}$$

tako da je: $\sin Nak = 0$, $\cos Nak \neq 0$. 6.5

Primenom rešenja 6.3 u jednačine 2 i 3 sistema 6.2 dobijamo ~~izraz~~ jednakosti, koje se svode na sistem homogenih linearnih jednačina po koeficijentima A_ν i B_ν i to:

$$A_\nu\left[\frac{\alpha'}{\alpha}\cos ak\nu-\cos ak(\nu-1)\right]+B_\nu\left[\frac{\alpha'}{\alpha}\sin ak\nu-\sin ak(\nu-1)\right]=0$$

$$A_\nu\left[\frac{\alpha'}{\alpha}\cos ak(N+\nu)-\cos ak(N+\nu+1)\right]+B_\nu\left[\frac{\alpha'}{\alpha}\sin ak(N+\nu)-\sin ak(N+\nu+1)\right]=0 \qquad 6.6$$

Da bi ovaj sistem imao netrivijalna rešenja za koeficijente A_ν i B_ν njegova determinanta mora biti ravna nuli, što dovodi do uslova:

$$\cos ak_0=\frac{\alpha'}{\alpha}, \qquad 6.7$$

$$k_0=\frac{1}{a}\arccos\frac{\alpha'}{\alpha}. \qquad 6.8$$

Ovde u suštini imamo samo jedno jedino stanje sa jednim talasnim vektorom k_0 .

Ako je ispunjen uslov 6.7 tada se nalazi:

$$\frac{B_\nu}{A_\nu}=-\operatorname{tg} ak\nu . \qquad 6.9$$

Transformaciona funkcija je oblika:

$$\xi_n=\sum_\nu A_\nu\left\{\cos ak_0(\nu+n)-\operatorname{tg} ak_0\nu\sin ak_0(n+\nu)\right\}e^{i\omega_k t}. \qquad 6.10$$

Uzećemo najprostiji oblik ove linearne kombinacije, a on se dobija za $\nu=0$ i oblika je:

$$\xi_n=A_0\cos ak_0 n\,e^{i\omega_0 t}. \qquad 6.11$$

Ako rešenje jednačine sistema 6.2 potražimo u obliku:

$$\xi_n=C e^{-\rho n-i\omega_\rho t}. \qquad 6.12$$

Primenom ovog rešenja u jednačinu 1 sistema 6.2 dobijamo:

$$\omega_\rho^2=4\frac{\alpha}{M}\operatorname{sh}^2\frac{\rho}{2}, \qquad 6.13$$

i zanemarivanjem

$$e^{-N\rho}\cong 0, \qquad 6.14$$

jednačine 2 i 3 svode se na identitet $0=0$, a iz druge jednačine dobijamo

$$e^\rho=\frac{\alpha'}{\alpha};\quad \ln\rho=\frac{\alpha'}{\alpha}. \qquad 6.15$$

Da bi ovo rešenje bilo lokalizovano oko $n=0$ mora biti $\rho>0$. Prema tome uslov $\alpha'>\alpha$ uslovljava postojanje površinskih stanja, a za $\alpha'\leq\alpha$ dobijamo zapreminska stanja i jednačinu 6.7. Kao što vidimo zapreminska i površinska stanja se uzajamno isključuju, tj. ako postoje zapreminska $\alpha' < \alpha$ površinskih nema i obrnuto. Ovo nije slučaj kod polubeskonačnog kristala. Ako krenemo obrnutim putem pa rešenje 6.12 potražimo u obliku:

$$\xi_n = C e^{-\rho(N-n) - i\omega_\rho t},$$

to jednačine 2 i 1 se svode na indentitet $0 = 0$, a iz jednačine 3 sistema 6.2 dobijamo rešenje 6.15. Sada ćemo dijagonalizovati hamiltonijan 6.1 za:

a) <u>zapreminska stanja</u>

rešenje tražimo u obliku: ~~dxx~~

$$\xi_n = C_{k_0} \cos a k_0 n \left\{ b_{k_0} e^{-it\omega_{k_0}} + b^+_{k_0} e^{it\omega_{k_0}} \right\}. \qquad 6.16$$

Izrazi za kinetičku i potencijalnu energiju postaju:

$$T = C^2_{k_0} \frac{M\omega^2_{k_0}}{4}(N+2) \left\{ b_{k_0} b^+_{k_0} + b^+_{k_0} b_{k_0} - b_{k_0} b_{k_0} e^{-2i\omega_{k_0} t} - b^+_{k_0} b^+_{k_0} e^{2i\omega_{k_0} t} \right\}$$

$$U = C^2_{k_0} \frac{M\omega^2_{k_0}}{4}(N+2) \left\{ b_{k_0} b^+_{k_0} + b^+_{k_0} b_{k_0} + b_{k_0} b_{k_0} e^{-2i\omega_{k_0} t} + b^+_{k_0} b^+_{k_0} e^{2i\omega_{k_0} t} \right\},$$

a hamiltonijan je oblika

$$H = C^2_{k_0} \frac{M\omega_{k_0}}{\hbar} (b^+_{k_0} b_{k_0}) \hbar \omega_{k_0} (N+2). \qquad 6.17$$

Konstantu C_{k_0} dobijamo kad normiramo hamiltonijan 6.17 pa je:

$$C_{k_0} = \sqrt{\frac{\hbar}{M\omega_{k_0}(N+2)}}. \qquad 6.18$$

Pošto je: $b_{k_0} b^+_{k_0} + b^+_{k_0} b_{k_0} = 1$ to je hamiltonijan oblika:

$$H = \hbar \omega_{k_0} \left(\frac{1}{2} + b^+_{k_0} b_{k_0}\right). \qquad 6.19$$

Fononski realni pomeraj je

$$\xi_n = \sqrt{\frac{\hbar}{M\omega_{k_0}(N+2)}} \cos n a k_0 \left\{ b_{k_0} e^{-i\omega_{k_0} t} + b^+_{k_0} e^{i\omega_{k_0} t} \right\}. \qquad 6.20$$

b) <u>površinska stanja</u>

Rešenje je oblika:

$$\xi_n = C_\rho e^{-\rho n} \left\{ b_\rho e^{-i\omega_\rho t} + b^+_\rho e^{i\omega_\rho t} \right\}. \qquad 6.21$$

Izraz za kinetičku i potencijalnu energiju su:

$$T = \frac{M\omega^2_\rho}{2} C^2_\rho \left\{ b_\rho b^+_\rho + b^+_\rho b_\rho - b_\rho b_\rho e^{-2i\omega_\rho t} - b^+_\rho b^+_\rho e^{2i\omega_\rho t} \right\}$$

$$U = \frac{M\omega^2_\rho}{2} C^2_\rho \left\{ b_\rho b^+_\rho + b^+_\rho b_\rho + b_\rho b_\rho e^{-2i\omega_\rho t} + b^+_\rho b^+_\rho e^{2i\omega_\rho t} \right\}.$$

Koristeci aproksimaciju $e^{-\rho}=0$ hamiltonijan je oblika

$$H = M\omega_\rho^2 C_\rho^2 \left(b_\rho^+ b_\rho + b_\rho b_\rho^+\right). \qquad 6.22$$

Koristeći $b_\rho b_\rho^+ + b_\rho^+ b_\rho = 1$ dobijamo:

$$H = 2M\omega_\rho^2 C_\rho^2 \left(\frac{1}{2} + b_\rho^+ b_\rho\right). \qquad 6.23$$

Iz normiranja hamiltonijana 6.22 nalazimo konstantu normiranja u obliku:

$$C_\rho = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_\rho}}\,. \qquad 6.24$$

Na kraju hamiltonijan i pomeraj atoma u elementarnoj ćeliji su:

$$H = \hbar\omega_\rho\left(\frac{1}{2} + b_\rho^+ b_\rho\right) \qquad 6.25$$

$$\xi_n = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_\rho}}\, e^{-n\rho}\left\{b_\rho e^{-i\omega_\rho t} + b_\rho^+ e^{i\omega_\rho t}\right\}. \qquad 6.26$$

7. Fononi u dvo i trodimenzionalnoj strukturi

Tanki film neograničen je u smeru x ose, a konačne i dovoljne male širine u smeru y ose. Za ovakav slučaj klasični hamiltonijan je oblika 5.1 gde je $\vec{n}=(n_x n_y)$

Razmatraćemo slučajeve $n_y>0$, $n_y=0$ i $n_y=N_y$.

Za $n_y>0$ komponentne jednačine kretanja su:

$$\begin{aligned}
&1.\ M\ddot{\xi}^x_{\vec{n}} + \lambda_0\xi^x_{\vec{n}} + \lambda\left(\xi^x_{\vec{n}+\vec{a}_1} + \xi^x_{\vec{n}-\vec{a}_1} + \xi^x_{\vec{n}+\vec{a}_2} + \xi^x_{\vec{n}-\vec{a}_2}\right) + \lambda_0^T\xi^y_{\vec{n}} = 0\\
&2.\ M\ddot{\xi}^y_{\vec{n}} + \lambda_0\xi^y_{\vec{n}} + \lambda\left(\xi^y_{\vec{n}+\vec{a}_1} + \xi^y_{\vec{n}-\vec{a}_1} + \xi^y_{\vec{n}+\vec{a}_2} + \xi^y_{\vec{n}-\vec{a}_2}\right) + \lambda_0^T\xi^x_{\vec{n}} = 0.
\end{aligned} \qquad 7.1$$

Koeficijenti su uvedeni analogno kao u paragrafu 5. Uzima se da su torzioni koeficijenti za dva susedna atoma ravna nuli, ~~[illegible]~~ jer su male veličine trećeg reda itd. (vidi paragraf 5). Upotrebljava se aproksimacija najbližih suseda pa za $n_y=0$ imamo:

$$\begin{aligned}
&1.\ M\ddot{\xi}^x_{\vec{n}} + (\lambda_0-\lambda_0')\xi^x_{\vec{n}} + \lambda\left(\xi^x_{\vec{n}+\vec{a}_1} + \xi^x_{\vec{n}-\vec{a}_1} + \xi^x_{\vec{n}+\vec{a}_2}\right) + \lambda_0^T\xi^y_{\vec{n}} = 0\\
&2.\ M\ddot{\xi}^y_{\vec{n}} + (\lambda_0-\lambda_0')\xi^y_{\vec{n}} + \lambda\left(\xi^y_{\vec{n}+\vec{a}_1} + \xi^y_{\vec{n}-\vec{a}_1} + \xi^y_{\vec{n}+\vec{a}_2}\right) + \lambda_0^T\xi^x_{\vec{n}} = 0,
\end{aligned} \qquad 7.2$$

i za $n_y = N_y$ imamo

$$1.\ M\ddot{\xi}^{x}_{\vec{n}} + (\lambda_0 - \lambda_0')\xi^{x}_{\vec{n}} + \lambda\left(\xi^{x}_{\vec{n}+\vec{a}_1} + \xi^{x}_{\vec{n}-\vec{a}_1} + \xi^{x}_{\vec{n}-\vec{a}_2}\right) + \lambda_0^T \xi^{y}_{\vec{n}} = 0$$

$$2.\ M\ddot{\xi}^{y}_{\vec{n}} + (\lambda_0 - \lambda_0')\xi^{y}_{\vec{n}} + \lambda\left(\xi^{y}_{\vec{n}+\vec{a}_1} + \xi^{y}_{\vec{n}-\vec{a}_1} + \xi^{y}_{\vec{n}-\vec{a}_2}\right) + \lambda_0^T \xi^{x}_{\vec{n}} = 0\ . \qquad 7.3$$

Rešenje sistema 7.1 tražimo po analogiji sa problemom u paragrafu 5 u obliku:

$$\xi^{j}_{\vec{n}} = A_j e^{ia(k_x n_x) - i\omega(k_x k_y)t} \cos n_y a k_y, \qquad 7.4$$

gde je $\vec{n}$ i $j = x, y$

Rešenje za $\cos a k_y$ odredjujemo iz uslova da izraz 7.4 bude istovremeno rešenje siste - ma 7.2 i 7.3 . Zbog toga dobijamo sistem linearnih jednačina po nepoznatim amplituda- ma A_x i A_y pa sistem 7.1 prelazi u:

$$\begin{aligned} &[-M\omega^2 + \lambda_0 + 2\lambda(\cos ak_x + \cos ak_y)]A_x + \lambda_0^T A_y = 0 \\ &\lambda_0^T A_x + [-M\omega^2 + \lambda_0 + 2\lambda(\cos ak_x + \cos ak_y)]A_y = 0, \end{aligned} \qquad 7.5$$

a sistem 7.2 u oblik

$$\begin{aligned} &[-M\omega^2 + \lambda_0 - \lambda_0' + \lambda(2\cos ak_x + \cos ak_y)]A_x + \lambda_0^T A_y = 0 \\ &\lambda_0^T A_x + [-M\omega^2 + \lambda_0 - \lambda_0' + \lambda(2\cos ak_x + \cos k_y)]A_y = 0, \end{aligned} \qquad 7.6$$

dok sistem 7.3 ima isti oblik kao 7.6 .

Pošto su sva tri sistema, sistemi homogenih linearnih jednačina, netrivijalna rešenja po A_x i A_y postaće ukoliko su im determinante jednake nuli, tj.

$$\begin{vmatrix} -M\omega^2 + \lambda_0 + 2\lambda(\cos ak_x + \cos ak_y) & \lambda_0^T \\ \lambda_0^T & -M\omega^2 + \lambda_0 + 2\lambda(\cos ak_x + \cos ak_y) \end{vmatrix} = 0 \qquad 7.7$$

i

$$\begin{vmatrix} -M\omega^2 + \lambda_0 - \lambda_0' + \lambda(2\cos ak_x + \cos ak_y) & \lambda_0^T \\ \lambda_0^T & -M\omega^2 + \lambda_0 - \lambda_0' + \lambda(2\cos ak_x + \cos ak_y) \end{vmatrix} = 0. \qquad 7.8$$

Pošto ovi sistemi imaju iste disperzione zakone, to uslovljava jednakost njihovih determinanata, a iz toga proizlazi:

$$\cos ak_y = -\frac{\lambda_0'}{\lambda} = \frac{\lambda_0''}{\lambda} \qquad (\lambda_0'' = -\lambda_0') \qquad . \quad 7.9$$

Ovo rešenje treba da zadovoljava sva tri naša sistema (7.1, 2 i 3), a to će biti slučaj ako su im determinante, sa svim svojim članovima, iste. Zamenimoli rešenje 7.9 u determinantu 7.8 dobijamo:

$$\begin{vmatrix} -M\omega^2+\lambda_0+2\lambda(\cos ak_x+\cos ak_y) & \lambda_0^T \\ \lambda_0^T & -M\omega^2+\lambda_0+2\lambda(\cos ak_x+\cos ak_y) \end{vmatrix} = 0 \quad . \qquad 7.10$$

Uporedimoli determinante 7.7 i 7.10 vidimo da su one potpuno iste.

Fononski pomeraj ovih atoma je oblika: linearne kombinacije tipa (7.4)

$$\vec{\xi}_{n_x n_y} = \sum_{\substack{k_x,\ell \\ \ell=1,2}} \vec{e}_{\ell}(k_x,k_y)\sqrt{\frac{\hbar}{N_x(N_y+2)\,M\omega_{\ell}(k_x,k_y)}}\, e^{ian_xk_x}\cos n_y a k_y \,\cdot \left\{b_{k_x,k_y,\ell}\, e^{-it\omega_\ell(k_x,k_y)} + b^+_{-k_x,-k_y,\ell}\, e^{it\omega_\ell(k_x,k_y)}\right\} \qquad 7.11$$

Analogno na isti način kao za zapreminske fonone nalazimo iz jednakosti determinanata

$$\xi_n = A e^{ian_xk_x - i\omega_\rho(\vec{k})t}\, e^{-n_y\rho} \qquad 7.12$$

$$\begin{vmatrix} -M\omega^2+\lambda_0+2\lambda(\cos ak_x+\operatorname{ch}\rho) & \lambda_0^T \\ \lambda_0^T & -M\omega^2+\lambda_0+2\lambda(\cos ak_x+\operatorname{ch}\rho) \end{vmatrix} = 0 \qquad 7.13$$

i

$$\begin{vmatrix} -M\omega^2+\lambda_0-\lambda_0'+\lambda(2\cos ak_x+e^{-\rho}) & \lambda_0^T \\ \lambda_0^T & -M\omega^2+\lambda_0-\lambda_0'+\lambda(2\cos ak_x+e^{-\rho}) \end{vmatrix} = 0 \qquad 7.14$$

rešenje u obliku:

$$e^{\rho} = \frac{\lambda_0''}{\lambda} \qquad \lambda_0'' = -\lambda_0' \qquad 7.15$$

Kad se zameni rešenje 7.15 u determinantu 7.14 uzimajući u obzir da je $Ch\rho=\frac{1}{2}(e^{-\rho}+e^{\rho})$ vidi se da su te determinante potpuno iste. U ovom slučaju za $n_y=N_y$ otpada treći sistem zbog uslova: $e^{-N\rho}=0$, a fononski pomeraj je oblika:

$$\vec{\xi}_{n_x,\rho}=\sum_{\substack{k_x,\rho\\ \ell=1,2}}\vec{e}_\ell(k_x,\rho)\sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_\rho(k_x,\rho)N_x}}\,e^{ian_xk_x}e^{-n_y\rho}\times$$
$$\times\left\{b_{k_x,\rho,\ell}\,e^{-it\omega_\rho(k_x,\rho)}+b^+_{-k_x,\rho,\ell}\,e^{it\omega_\rho(k_x,\rho)}\right\} \qquad 7.16$$

Ako je film beskonačan u smeru x i y ose, a u smeru z ose ima konačnu i ne mnogo veliku debljinu govori se o trodimenzionalnom slučaju. Ovaj slučaj potpuno je istovetan sa slučajem koji je opisan u paragrafu 5, samo se ovde za zapreminska stanja javlja još jedan sistem jednačina za $n_z=N_z$, pa se uzimaju sistemi 5.2 i 5.3 sa sistemom za $n_z=N_z$ koji se piše u obliku:

$$1.\ M\ddot{\xi}^x_{\vec{n}}+(\lambda_0-\lambda_0')\xi^x_{\vec{n}}+\lambda\left(\xi^x_{\vec{n}+\vec{a}_1}+\xi^x_{\vec{n}-\vec{a}_1}+\xi^x_{\vec{n}+\vec{a}_2}+\xi^x_{\vec{n}-\vec{a}_2}+\xi^x_{\vec{n}-\vec{a}_3}\right)+\lambda_0^T\left(\xi^y_{\vec{n}}+\xi^z_{\vec{n}}\right)=0$$
$$2.\ M\ddot{\xi}^y_{\vec{n}}+(\lambda_0-\lambda_0')\xi^y_{\vec{n}}+\lambda\left(\xi^y_{\vec{n}+\vec{a}_1}+\xi^y_{\vec{n}-\vec{a}_1}+\xi^y_{\vec{n}+\vec{a}_2}+\xi^y_{\vec{n}-\vec{a}_2}+\xi^y_{\vec{n}-\vec{a}_3}\right)+\lambda_0^T\left(\xi^x_{\vec{n}}+\xi^z_{\vec{n}}\right)=0$$
$$3.\ M\ddot{\xi}^z_{\vec{n}}+(\lambda_0-\lambda_0')\xi^z_{\vec{n}}+\lambda\left(\xi^z_{\vec{n}+\vec{a}_1}+\xi^z_{\vec{n}-\vec{a}_1}+\xi^z_{\vec{n}+\vec{a}_2}+\xi^z_{\vec{n}-\vec{a}_2}+\xi^z_{\vec{n}-\vec{a}_3}\right)+\lambda_0^T\left(\xi^x_{\vec{n}}+\xi^y_{\vec{n}}\right)=0$$
$$7.17$$

Rešenje se traži u obliku

$$\xi_{\vec{n}}=A_j\,e^{ia(n_xk_x+n_yk_y)-i\omega(k_xk_y)t}\cos n_zak_z \qquad 7.18$$

a na potpuno analogan način kao u paragrafu 5 i ovde za dve dimenzije, dobijamo iz uslova jednakosti determinenata za ovaj slučaj (tri dimenzije) daje:

$$\cos ak_z=-\frac{\lambda_0''}{\lambda} \qquad \lambda_0''=-\lambda_0' \qquad 7.19$$

Kad se rešenje 7.19 uvrsti u determente dobije se potpuno ista determinenta za sva tri sistema. Ovo razmatranje je izvedeno za rešenje prikazano 7.18 ali ono važi i za bilo kakvo drugo simetrično rešenje.

$\cos n_z a k_z^0$

Hamiltonijan se dijagonalizovao i pomeraj je oblika:

$$\vec{\xi}_{n_x,n_y,n_z}=\sum_{\substack{k_xk_y\ell\\ \ell=1,2,3}}\vec{e}_\ell(k_x,k_y,k_z)\sqrt{\frac{\hbar}{N_xN_y(N_z+2)M\omega_\ell(k_x,k_y,k_z)}}\,e^{ia(n_xk_x+n_yk_y)}\cos n_zak_z\cdot$$
$$\cdot\left\{b_{k_x,k_y,k_z,\ell}\,e^{-it\omega_\ell(k_x,k_y,k_z)}+b^+_{-k_x,-k_y-k_z,\ell}\,e^{it\omega_\ell(k_x,k_y,k_z)}\right\} \qquad 7.20$$

Ovo su zapreminski fononi, a slučaj površinskih stanja potpuno je isti kao u problemu površkinskih stanja u polubeskonačnom kristalu, opisanom u paragrafu 5 sa jedinom razlikom što je pomer j oblika:

$$\vec{\xi}_{n_x n_y \rho} = \sum_{\substack{k_x, k_y, \ell \\ \ell = 1,2,3}} \vec{e}_{\ell (k_x, k_y, \rho)} \sqrt{\frac{\hbar}{N_x N_y 2M\omega_\rho (k_x, k_y, \rho)}}\, e^{ia(n_x k_x + n_y k_y)} e^{-n_z \rho} \times$$
$$\times \left\{ b_{k_x, k_y, \rho, \ell}\, e^{-it\omega_\ell (k_x, k_y, \rho)} + b^+_{-k_x, -k_y, \rho, \ell}\, e^{it\omega_\rho (k_x, k_y, \rho)} \right\} \qquad 7.21$$

8. Termodinamika sva tri dela i poredjenje sa trodimenzionalnim kristalom

U prethodnim paragrafima ispitivali smo termodinamička svojstva idealnog kristala. Razmatrali smo granične slučajeve, na niskim i na visokim temperaturama i data je interpolaciona Debajeva formula (paragraf 3), koja veoma dobro opisuje oba ova slučaja. Ovde ćemo pokazati kako se tanki film ponaša na različitim temperaturama tj. napisat ćemo termodinamičke karakteristike filma i povući analogiju sa idealnim kristalom. Pri računanju uvodi se Debajeva temperatura obrascem

$$h\nu_{max} = \Theta_D \qquad 8.1$$
$$h = 2\pi\hbar \; .$$

Posto je:

$$K_{max} = \frac{\nu}{C} = \frac{\nu_{max}}{C} = \frac{\Theta_D}{2\pi\hbar C} \; , \qquad 8.2$$

gde je C brzina longitudinalnih talasa i dve grane transvezalnih talasa. Sve tri brzine obično se aproksimiraju nekom srednjom brzinom po formuli:

$$\frac{1}{\bar{C}^2} = \frac{1}{C_\ell^2} + \frac{2}{C_t^2} \; . \qquad 8.3$$

Pa je

$$K_{max} = \frac{\Theta_D}{2\pi\bar{C}\hbar}$$

Konstanta rešetke a i broj atoma u ploči dati su sa:

$$a = 4\pi^{3/2}\frac{\hbar\bar{c}}{\theta_D}, \qquad 8.4$$

$$N_z = \frac{L}{a} = \frac{L\,\theta_D}{4\pi^{3/2}\hbar\bar{c}}, \qquad 8.5$$

gde je L - debljina ploče; θ_D- Debajeva temperatura.

Unutrašnju energiju ploče odredjujemo pomoću zakona desperzije

$$\omega_l = \hbar C_e(\vec{k}) = \hbar\bar{C}_e\sqrt{k_x^2+k_y^2+k_0^2}, \qquad 8.6$$

pa je

$$U = \sum_{l k_x k_y}\frac{\hbar\bar{c}\sqrt{k_x^2+k_y^2+k_0^2}}{e^{\frac{\hbar\bar{c}}{\theta}\sqrt{k_x^2+k_y^2+k_0^2}}-1} = 3\hbar\bar{c}\frac{N_x N_y a^2}{(2\pi)^2}\int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^{k_{max}}\frac{\sqrt{k^2+k_0^2}\,k.dk}{e^{\frac{\hbar\bar{c}}{\theta}\sqrt{k^2+k_0^2}}-1}.$$

Pomoću smene

$$\frac{\hbar\bar{c}}{\theta}\sqrt{k^2+k_0^2} = x; \quad dx = \frac{\hbar\bar{c}}{\theta}\frac{k\,dk}{\sqrt{k^2+k_0^2}},$$

$$X_{min} = \frac{\hbar\bar{c}k_0}{\theta}; \quad X_{max} = \sqrt{\left(\frac{\theta_D}{2\pi\theta}\right)^2+\left(\frac{\hbar\bar{c}k_0}{\theta}\right)^2} \qquad 8.7$$

Unutrašnja energija je:

$$U = 12\sqrt{\pi}\,N\frac{\hbar\bar{c}}{L}\left(\frac{2\pi\theta}{\theta_D}\right)^3\int_{X_{min}}^{X_{max}}\frac{x^2\,dx}{e^x-1}. \qquad 8.8$$

Rešenje integrala je

$$\int x^2 e^{-nx}dx = -\frac{e^{-nx}}{n}\left(x^2+\frac{2x}{n}+\frac{2}{n^2}\right). \qquad 8.9$$

1) Za zapreminske fonone unutrašnja energija je

$$U = 12\pi^{1/2}\frac{N\hbar\bar{C}}{L}\left(\frac{2\pi\theta}{\theta_D}\right)^3\left\{R_\theta^2 Z_{1(R_\theta)} - S_\theta^2 Z_{1(S_\theta)} + 2\left[R_\theta Z_{2(R_\theta)} - S_\theta Z_{2(S_\theta)}\right] + 2\left[Z_{3(R_\theta)} - Z_{3(S_\theta)}\right]\right\}, \qquad 8.10$$

gde je:

$$R_\theta = X_{min} \quad ; \quad Z_p(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-nx}}{n^p} . \qquad 8.11$$
$$S_\theta = X_{max}$$

Za visoke temperature imamo: $\frac{\hbar \bar{c} \omega}{\theta} \ll 1 \; ; \; X = 0 \; ; \; e^x - 1 = x,$

pa je:

$$U_{vis} = 12\pi^{3/2} N \frac{\hbar \bar{c} \theta}{L \theta_D} . \qquad 8.12$$

Specifisna toplota je:

$$C = \frac{\partial U_{vis}}{\partial \theta} = 12\pi^{3/2} N \frac{\hbar \bar{c}}{L \theta_D} = Const. \qquad 8.13$$

Za niske temperature imamo:

$$\frac{\hbar \bar{c} \omega}{\theta} \to \infty \; ; \; x \gg 1 \; ; \; e^x - 1 \approx e^x,$$

$$\cos a k_0 = \frac{\alpha'}{\alpha} \; ; \; k_0 = \frac{\theta_D}{4\pi^{3/2} \hbar \bar{c}} \arccos \frac{\alpha'}{\alpha} . \qquad 8.14$$

Unutrašnja energija je oblika:

$$U_{nis} = 6\pi^{1/2} N \frac{\hbar \bar{c}}{L} \frac{\theta}{\theta_D} e^{-\frac{\theta_D}{\theta} \frac{\arccos \frac{\alpha'}{\alpha}}{4\pi^{3/2}}} \arccos^2 \frac{\alpha'}{\alpha}, \qquad 8.15$$

specifična toplota je

$$C_v = \frac{\partial U_{nis}}{\partial \theta} = \frac{3}{2} \frac{N \hbar \bar{c}}{\pi L} \left(\arccos \frac{\alpha'}{\alpha} \right)^3 \frac{1}{\theta_D} e^{-\frac{\theta_D}{\theta} \frac{\arccos \frac{\alpha'}{\alpha}}{4\pi^{3/2}}} . \qquad 8.16$$

2) Za površinska stanja

a) Unutrašnja energija i specifična toplota su iste na visokim temperaturama kao kod zapreminskih stanja jednačine 8.12 i 8.13.

b) Na niskim temperaturama uzima se u obzir: jednačina 4.17 pa je:

$$\rho = \ln \frac{\alpha'}{\alpha}$$

$$U_{nis} = 6\pi^{1/2} N \frac{\hbar \bar{c}}{L} \frac{\theta}{\theta_D} \frac{1}{a^2} e^{-\frac{\theta_D}{a\theta} \frac{\ln \frac{\alpha'}{\alpha}}{4\pi^{3/2}}} \ln^2 \frac{\alpha'}{\alpha} \qquad 8.17$$

i

$$C_{vis} = \frac{3}{2} \frac{N}{\pi} \frac{\hbar \bar{c}}{L} \left(\ln \frac{\alpha'}{\alpha} \right)^3 \frac{1}{a^2 \theta} e^{-\frac{\theta_D}{a\theta} \frac{\ln \frac{\alpha'}{\alpha}}{4\pi^{3/2}}} . \qquad 8.18$$

Za zapreminska stanja imamo za $\theta \to 0$, $C_v \to 0$ kao $\frac{A}{\theta} e^{-\frac{B}{\theta}}$ $(A, B > 0)$

što znači da ona eksponencijalno opada, a za površinske fonone za $\theta \to 0$, $C_v \to 0$

kao $\frac{A'}{\theta} e^{-\frac{B}{\theta}}$ (A' , $B' > 0$) tako isto opada kao kod zapreminskih fonona. Poredeći izraze za unutrašnju energiju i specifičnu toplotu ploče i idealnog kristala dolazimo do zaključka da bitne razlike nastaju na niskim temperaturama, dok u idealnom kristalu specifična toplota opada proporcionalno trećem stepenu temperature u slučaju ploče, koja je takodje trodimenzionalna specifična toplota opada mnogo brže tj. po zakonu $C_V \sim \frac{A}{T} e^{-\frac{B}{T}}$ gde su A i B pozitivne konstante.

Ovo povlači za sobom odredjene fizičke konsekvence, a najvažnija od njih je ta da se u ploči na niskim temperaturama uticaj fonona na druge efekte može zanemariti sa više prava nego u idealnom kristalu.

Na visokim temperaturama i ploča i idealni kristal ponašaju se približno isto tj. specifična toplota teži konstanti u oba slučaja.

Razume se te dve konstante nisu iste, jer u slučaju ploče specifična toplota zavisi od njene debljine.

Z A K L J U Č A K

Rezultati analize fononskih stanja u tankim filmovima mogu se rezimirati na sledeći način:

a) U filmu mogu da postoje ili zapreminska ili površinska fononska stanja, pri čemu postojanje jednih isključuje postojanje drugih.

b) Po svojim osobinama film je mnogo bliži dvodimenzionalnoj strukturi nego trodimenzionalnoj jer je komponenta talasnog vektora duž pravca narušenja simetrije uvek konstantna (i kod površinskih i kod zapreminskih fonona). Ova činjenica u vezi sa onim što je rečeno u uvodu, navodi na misao da nije neophodno koristiti strogo dvodimenzionalne strukture (1 sloj) već je dovoljno koristiti film konačne debljine koji se tehnički daleko lakše može realizovati. U smislu fononskih efekata tanki metalni film davaće slične rezultate, kao i čist dvodimenzionalni list.

c) Pokazano je da se na niskim temperaturama broj fonona u ploči oštro smanjuje sa opadanjem temperature, tj. mnogo brže nego u idealnoj trodimenzionalnoj strukturi. U vezi sa problemom superprovodljivosti, to znači da će u ovakvoj strukturi fononi teže razgradjivati ~~u~~ kuperovske parove, a to znači da će uslovi superkonduktivnosti ploče biti bolji nego isti uslovi za trodimenzionalnu idealnu strukturu.

L I T E R A T U R A

1 A. I. Anselj m, "Vedenije v teoriju poluprovodnikov" GIFML, Moskva-1962-Leningrad

2 A. S. Davidov, "Kvantovaja mehanika", FIZMATGIZ, Moskva 1963

3 S. I. Pekar, ŽETF 33, 1022 (1957)

4 V. I. Sugakov, FTT 5, 2207 (1963)

5 Stanoje D. Stojanović Magistarski rad - Zapreminska i površinska magnonska stanja i mogućnosti koncentracije magnetne energije na površini feromagnetnog kristala BEOGRAD (1973)

6 S. Stojanović and. B.S. Tošić: Volume and Surface Magnon States (phys. stat. sol. 32 229 1969)