

D-374

УНИВЕРЗИТЕТ У НОВОМ САДУ  
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ

ПРИМЉЕНО		14	IV	1998
0603		9/2		

UNIVERZITET U NOVOM SADU  
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET  
INSTITUT ZA FIZIKU

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

**JEDNOELEKTRONSKA STANJA  
U TANKOSLOJNIM KRISTALIMA**

M E N T O R

P R O F . D R J O V A N Š E T R A J Č I Ć

K A N D I D A T

D A N I J E L A R A D L O V I Ć

NOVI SAD, 1998. godine

*„Lepota traženja nije u nalaženju,  
nego u našoj odluci da tražimo.”*

M. Antić

*Najveću zahvalnost na pomoći prilikom izbora teme i izrade ovog diplomskog rada dugujem svom mentoru prof. dr Jovanu Šetrajčiću i koleginici mr Sladjani Stojković. Takodje bih želela da zahvalim i svojoj porodici, cimerkama, prijateljima Tanji i Predragu, kao i mojoj dragoj Danijeli (jer je kroz sve ovo prošla zajedno sa mnom) koji su mi, svako na svoj način, pružili podršku i razumevanje.*

## SADRŽAJ

	Strana
1. <b>Uvod</b> .....	4
2. <b>Elektronska struktura kristala</b> .....	5
2.1. Degenerisani elektronski gas .....	5
2.2. Uticaj periodičnog potencijala na elektrone .....	7
2.3. Brzina i ubrzanje elektrona .....	9
2.4. Tenzor recipročne efektivne mase .....	9
2.5. Zakon disperzije elektrona .....	11
3. <b>Visokotemperaturski superprovodnici</b> .....	13
4. <b>Elektronski spektri idealnih film-struktura</b> .....	16
4.1. Model elektronskog filma .....	16
4.2. Jednočestićna stanja elektrona u filmu .....	17
4.3. Energetski spektar elektrona idealne film-strukture .....	22
5. <b>Zaključak</b> .....	26
6. <b>Dodatak: Čebiševljevi polinomi</b> .....	27
7. <b>Literatura</b> .....	29

## 1. Uvod

Od velikog značaja za teoriju čvrstog stanja je ispitivanje udela i uticaja elektronskog podsistema na fizičke karakteristike materijala, jer su upravo elektroni nosioci svih transportnih i drugih fizički interesantnih procesa. Posebno interesantno je njihovo ponašanje kao nosioca bezotporne električne struje, u superprovodnom stanju, jer ga karakteriše sparivanje fermiona (elektrona ili šupljina) koje je prisutno od niskotemperaturske do visokotemperaturske superprovodnosti.

Moderna nauka o materijalima teži preciznom strukturiranju materijala do što manjih dimenzija - reda veličine nanometara, a fenomeni povezani sa tako malim dimenzijama dovode do specifičnih pojava i izmenjenih osobina materijala. Ove strukture su od šireg praktičnog značaja posebno na polju elektronike, optoelektronike i visokotemperaturske superprovodnosti. Iz tog razloga, u savremenoj fizici kondenzovane materije jedan od glavnih pravaca teorijskih i eksperimentalnih istraživanja je ispitivanje osobina niskodimenzionih sistema (superrešetke, kvantne žice i kvantne tačke), a pre svega tankih filmova<sup>1</sup>.

U ovom radu je ispitana uticaj granica film-struktura na energetski spektar i moguća stanja elektrona (elektronski zakon disperzije). Dobijeni rezultati poređeni su sa odgovarajućim za idealne beskonačne kristale, da bi se na osnovu toga uočile najbitnije razlike ova dva sistema.

Pomenuta analiza vršena je korišćenjem metoda jednočestičnih talasnih funkcija<sup>2</sup> koji se danas veoma često koristi u kvantnoj teoriji čvrstog stanja. Zahvaljujući ugradjenoj statistici, taj metod se uspešno primenjuje kod izračunavanja kako mikroskopskih tako i makroskopskih, ravnotežnih i neravnotežnih svojstava kristala.

Ovde je najpre vršena analiza idelanih beskonačnih kristalnih struktura, a zatim isti metod primenjen na film-strukture.

<sup>1</sup>Filmovi predstavljaju beskonačne strukture u svim kristalnim ravnima paralelnim dvema graničnim površima, koje su normalne na jedan prioritetan pravac, duž koga je posmatrani sistem ograničen.

<sup>2</sup>Postoje i drugi metodi pomoću kojih se ovaj problem može tretirati: metod Hajzenbergovih jednačina kretanja, metod malih perturbacija, metod dvovremenskih temperaturskih Grinovih funkcija i sl.

## 2. Elektronska struktura kristala

Periodična promena mnogih fizičkih veličina kod idealnih kristalnih struktura (kao što je na primer promena potencijalne energije elektrona, sa periodima kristalne rešetke, u kristalu) posledica je translacione invarijantnosti ovakvih struktura.

U teoriji fizike čvrstog stanja posebno je važno proučavanje promena diskretnog energetskog spektra elektrona izolovanih atoma pri približavanju atoma i obrazovanju kristalne strukture. Pri ovom procesu usled interakcije medju atomima periodično električno polje kristala dovodi do cepanja energetskih nivoa elektrona slobodnih atoma. Naime, ukoliko kristal tretiramo kao gigantski molekul, zbog Paulijevog principa isključenja kvantna stanja elektrona u tom molekulu moraju biti okarakterisana različitim kvantnim brojevima, a posledica toga je formiranje čitavog spektra energetskih nivoa u izolovanom atomu. Umesto jednog energetskog nivoa, jednakog za svih  $N$  izolovanih atoma u čvrstom telu se pojavljuje  $N$  blisko rasporedjenih nivoa koji obrazuju energetsku zonu. Utvrđeno je da se svi nivoi ne cepaju jednakо<sup>3</sup>, već da se više cepaju spoljašnji - valentni nivoi, a uzrok tome je što se talasne funkcije spoljašnjih valentnih elektrona susednih atoma medjusobno veoma preklapaju. To dovodi do kolektiviziranosti ovih stanja, kojima se na taj način atomi povezuju u kristal - gigantski molekul, pa se na nih primenjuje Paulijev princip isključenja za kolektivizirane, kristalne energetske nivoe. Ovi kolektivizirani elektroni nisu vezani sa atomima kristalne rešetke i mogu se premeštati po celoj zapremini metala.

U slučaju da elektron napusti atom u kristalu, on se pod dejstvom primjenjenog električnog polja ne kreće sasvim slobodno već je podvrgnut uticaju kristalnog polja. Uvodnjem efektivne mase kvazislobodnih nosilaca nanelektrisanja može se ovaj uticaj kristalnog polja usrednjeno uzeti u obzir. Zbog anomalnog ponašanja kvazislobodnih elektrona na krajevima valentne zone takodje se uvodi pojam kvazislobodnih nosilaca - šupljina.

Veliki broj pojava vezanih za ponašanje elektrona u kristalima uspešno se opisuje modelom kvazislobodnih elektrona, dok se uticaj jona kristalne rešetke svodi na to da se obezbedi ukupna neutralnost kristala, kao i na rasejavanje kvazislobodnih nosilaca.

### 2.1. Degenerisani elektronski gas

Polazeći od modela slobodnih elektrona može se razumeti veliki broj važnih fizičkih osobina metala. Prema ovom modelu, najslabije vezani elektroni atoma kreću se skoro slobodno kroz zapreminu metala. Valentni elektroni atoma postaju provodnici elektriciteta u metalima i nazivaju se provodnim elektronima. Sile izmedju ovih elektrona i jona se zanemaruju u aproksimaciji slobodnih elektrona, pa se u svim proračunima smatra da se provodni elektroni kreću slobodno svuda u unutrašnjosti uzorka. Totalna energija jednak je kinetičkoj dok se potencijalna ne uzima u obzir. Stvarna raspodela nanelektrisanja provodnih elektrona je rezultat uticaja jakog električnog potencijala jona. Upotrebljivost ovog modela zavisiće u suštini od kinetičkih svojstava provodnih elektrona.

Provodni elektron se u metalu može kretati po pravoj putanji dužine većeg broja medjuatomskih rastojanja a da se pri tom ne sudari sa drugim elektronima ili atomskim ostacima, što znači da se provodni elektroni u tom smislu ponašaju kao gas neinteragujućih

<sup>3</sup>Energetski nivoi unutrašnjih elektrona cepaju se veoma slabo i to pri vrlo malim rastojanjima medju atomima (mnogo manjim od perioda kristalne rešetke).

čestica. Ovo je uslovljeno time što slobodan elektron ne skreće pod uticajem jona uređenih u periodičnu rešetku, jer se talasi materije prostiru slobodno u periodičnim strukturama, kao i time što se zbog Paulijevog principa isključenja provodni elektron retko sudara sa drugim provodnim elektronima.

Dakle, elektroni u metalima mogu se posmatrati kao elektroni u Fermijevom gasu slobodnih čestica (gas slobodnih neinteragujućih čestica koje se pokoravaju Paulijevom principu isključenja) čije su energije zadate energijom translacije:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad (2.1)$$

gde je  $\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$  - talasni vektor.

$$\text{U slučaju kada je } e^\nu \ll 1; \quad \nu = \frac{\mu}{kT}.$$

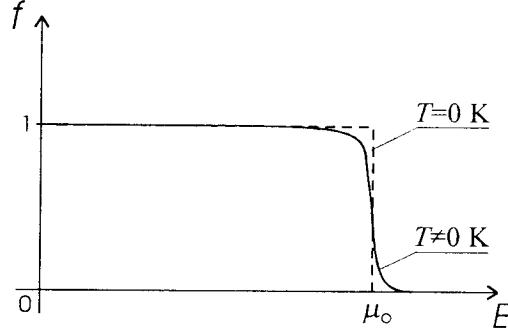
$\mu$  - hemijski potencijal, kvantni efekti postaju dominantniji ako je toplotna energija znatno niža od hemijskog potencijala:  $\mu \gg kT$ . Na apsolutnoj nuli čestice popunjavaju redom najniža kvantna stanja, saglasno Paulijevom principu. Takav gas nazivamo potpuno degenerisanim fermionskim gasom.

Raspodela elektrona u kristalu po energijama, pri nekoj temperaturi  $T$  potčinjava se Fermi-Dirakovoj statistici, saglasno kojoj se verovatnoća nalaženja elektrona u stanju sa energijom  $E$  opisuje Fermi-Dirakovom funkcijom raspodele (slika 2.1):

$$f = \left[ \exp\left(\frac{E - \mu}{kT} + 1\right) \right]^{-1}$$

$$\text{na } T = 0 \text{ K, } f_0 = \begin{cases} 1 & E \leq \mu_0 \\ 0 & E > \mu_0 \end{cases}$$

$\mu_0$  - vrednost hemijskog potencijala na apsolutnoj nuli.



Slika 2.1: Fermijeva funkcija raspodele elektrona

Na  $T = 0$  K sva stanja sa energijama manjim od  $\mu_0$  su popunjena, a viša energetska stanja su prazna, pa je  $\mu_0$  jednak graničnoj energiji degenerisanog gasa.

Zauzeta stanja na  $T = 0$  K mogu se prikazati sferom u prostoru talasnog vektora, koja se zove Fermijeva sfera. Njen radijus je Fermijev talasni vektor  $\vec{k}_F$ , koji određuje graničnu - Fermijevu energiju:

$$\mu_0 = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}. \quad (2.2)$$

Temperatura pridružena ovoj energiji je temperatura degeneracije:  $T_F = \mu_0/k_B$ . Fermionski gas je degenerisan u području gde važi  $T \ll T_F$ . Brzina čestice obračunata od vrha Fermijeve raspodele može da se izrazi pomoću  $k_F$ , odnosno pomoću, granične brzine fermiona na apsolutnoj nuli:  $v_F = \hbar k_F/m$ .

Kako je ukupna energija osnovnog stanja fermionskog gasa:

$$E_U = \int f E dN = \frac{3}{5} N \mu_0, \quad (2.3)$$

srednja energija biće:  $E_0 = (E_U/N) = (3/5)\mu_0$ , gde je  $N$  ukupan broj čestica gasa.

## 2.2. Uticaj periodičnog potencijala na elektrone

Nalaženje egzaktne kvantitativne teorije koja bi objasnila nastajanje zonalne energetske strukture u kristalu predstavlja važan, ali do sada nerešen problem teorije čvrstog stanja. U strogom smislu, elektroni i joni u kristalu čine jedan kvantni sistem, čije rešenje treba naći. Pošto je rešavanje ovakvog sistema suviše komplikovano pribegava se raznim aproksimacijama. Ako se elektroni posmatraju kao nezavisne čestice koje se kreću pod ukupnim uticajem svih sila i zanemare nepravilnosti u gradji kristalne rešetke kao i oscilovanja atoma oko ravnotežnih položaja, uzima se da se svaki elektron kreće u potencijalu koji je periodičan sa periodom kristalne celije:

$$U(\vec{r}) = U(\vec{r} + \vec{n}) . \quad (2.4)$$

gde je  $\vec{n} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$  - vektor translacije kristalne rešetke. U takvom periodičnom potencijalu talasne funkcije elektrona imaju neka opšta svojstva koja proizilaze neposredno iz Šredingerove jednačine:

$$H \Psi = E \Psi , \quad (2.5)$$

pri čemu je Hamiltonov operator:

$$H(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{r}) . \quad (2.6)$$

Razmatra se kako se translaciona simetrija odražava na svojstva talasnih funkcija elektrona  $\Psi_n(\vec{r})$  odnosno na svojstvene funkcije hamiltonijana  $H$ . Delovanje operatora translacije  $T_{\vec{n}}$  definisano je na sledeći način:

$$T_{\vec{n}} \Psi_n(\vec{r}) = \Psi_n(T_{\vec{n}} \vec{r}) = \Psi_n(\vec{r} - \vec{n}) , \quad (2.7)$$

gde funkcija  $\Psi_n(\vec{r} - \vec{n})$  pripada istom funkcijskom (Hilbertovom) prostoru kao i  $\Psi_n(\vec{r})$ . Pošto je hamiltonijan  $H$  translaciono invarijantan, što znači da komutira sa operatom  $T_{\vec{n}}$ , a  $\Psi_n(\vec{r})$  je i njegova svojstvena funkcija, to na osnovu gornje relacije sledi

$$H [T_{\vec{n}} \Psi_n(\vec{r})] = T_{\vec{n}} [H \Psi_n(\vec{r})] = T_{\vec{n}} [E_n \Psi_n(\vec{r})] = E_n [T_{\vec{n}} \Psi_n(\vec{r})] . \quad (2.8)$$

gde je  $E_n$  svojstvena vrednost jednoelektronskog hamiltonijana  $H$ . Iz relacije (2.8) sledi da su i  $\Psi_n(\vec{r})$  i  $T_{\vec{n}} \Psi_n(\vec{r})$  svojstvene funkcije hamiltonijana  $H$  sa istom svojstvenom vrednošću  $E_n$ . Ako je  $E_n$  nedegenerisana svojstvena vrednost, onda joj odgovara samo jedna svojstvena funkcija, pa sledi da su u tom slučaju funkcije  $\Psi_n(\vec{r})$  i  $T_{\vec{n}} \Psi_n(\vec{r})$  jednakе do na fazni množitelj, odnosno da je

$$T_{\vec{n}} \Psi_n(\vec{r}) = t_{\vec{n}} \Psi_n(\vec{r}) ; \quad |t_{\vec{n}}|^2 = 1 , \quad (2.9)$$

pri čemu fazni množitelj  $t_{\vec{n}}$  ima smisao svojstvene vrednosti operatora  $T_{\vec{n}}$ .

Lako se pokazuje da za talasne funkcije važe sledeća transformaciona svojstva:

$$T_{\vec{n}} \Psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) \equiv T_{\vec{n}}^{\vec{k}} \Psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \Psi_{n\vec{k}}(\vec{r} - \vec{n}) = e^{-i\vec{k}\vec{n}} \Psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) , \quad (2.10)$$

gde je uveden indeks  $\vec{k}$  jer talasne funkcije zavise od talasnog vektora  $\vec{k}$ . Iz ovih relacija sledi da je  $t_{\vec{n}} \equiv t_{n\vec{k}} = e^{-i\vec{k}\vec{n}}$ .

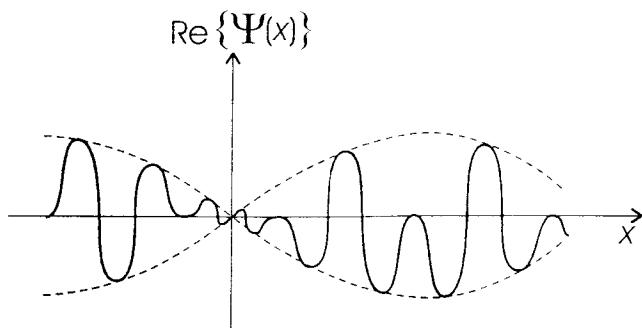
Iz gornjih jednačina takodje sledi da jednoelektronska talasna funkcija zadovoljava relaciju

$$\Psi_{n\vec{k}}(\vec{r} - \vec{n}) = e^{-i\vec{k}\vec{n}} \Psi_{n\vec{k}}(\vec{r}). \quad (2.11)$$

Da bi funkcija  $\Psi_{n\vec{k}}(\vec{r})$  zadovoljavala prethodnu relaciju mora da bude oblika:

$$\Psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \Phi_{n\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}}. \quad (2.12)$$

Poslednje dve relacije predstavljaju matematičke iskaze *Blobove teoreme*. Za  $\Phi = \text{const}$  iz drugog oblika ove teoreme sledi da talasna funkcija elektrona ima oblik ravnog talasa, pri čemu  $\vec{k}$  ima smisao talasnog vektora. Za elektron u kristalu, kada  $\Phi$  nije konstanta, može se smatrati da  $\vec{k}$  ima isti smisao, ali u tom slučaju, što inače sledi iz Blobove teoreme, talasna funkcija je funkcija položaja sa periodom rešetke. Ova talasna funkcija se naziva *Blobova talasna funkcija* (slika 2.2). Konkretan oblik modulisane amplitute  $\Phi$  zavisi od oblika periodičnog potencijala kristala koji deluje na elektron.



Slika 2.2: Realni deo Blobove funkcije uzduž čvornih veza u kristalnoj rešetki

Uvrštavanjem Blobove funkcije u Šredingerovu jednačinu (2.6), dobija se nova jednačina za periodični faktor:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla + i\vec{k})^2 \Phi_{n\vec{k}} + U(\vec{r}) \Phi_{n\vec{k}} = E_{n\vec{k}} \Phi_{n\vec{k}}(\vec{r}). \quad (2.13)$$

Pošto su talasne funkcije i energije elektrona periodične u prostoru inverzne rešetke, to je dovoljno svojstveni problem hamiltonijana rešavati samo u oblasti koja odgovara zaređenim jedne elementarne celije, pri čemu na granicama te oblasti treba zadati periodične granične uslove<sup>4</sup>.

Za neke energije talasni vektor  $\vec{k}$  postaje kompleksan. Takve vrednosti se isključuju iz energetskog spektra jer, u protivnom, gustina verovatnoće ne bi imala svojstvo translacione invarijantnosti. Suprotno od energije slobodnog elektrona, energija elektrona u periodičnom potencijalu ne može da se kontinualno menja. Potpuni spektar prethodne jednačine, dakle, zavisi od celog broja  $\hbar$  parametra  $\vec{k}$ , što se može predstaviti kao niz energetskih zona  $E_n(\vec{k})$ . Za svaki broj  $\hbar$  postoji kontinuum energija odredjene širine, čije zone mogu biti razmaknute ili se prekrivaju. U svakoj zoni ima ukupno  $N$  energetskih nivoa, pri čemu ako je  $N$  dovoljno veliko, onda se susedne diskrete vrednosti  $\vec{k}$  malo razlikuju, pa se može uzeti da je  $\vec{k}$  neprekidna promenljiva i da je  $E_{\vec{k}}$  neprekidna funkcija talasnog vektora.

<sup>4</sup>Funkcija  $\Phi_{n\vec{k}}$  mora biti ista na suprotnim stranicama celije, što su granični uslovi jednačine.

### 2.3. Brzina i ubrzanje elektrona

Kvazislobodni elektroni u metalu čine degenerisan gas, odnosno, podvrgavaju se kvantnoj Fermi-Dirakovojoj statistici, pa je stoga potrebno napustiti klasičnu predstavu elektrona kao čestice i posmatrati njegovu dualnu (čestično-talasnu) kvantnomehaničku prirodu.

Jedan od pogodnih načina prikazivanja elektrona je u vidu tzv. talasnog paketa gde je čestični aspekt elektrona izražen njegovom lokalizacijom u intervalu gde je rezultujuća amplituda talasnog paketa različita od nule. Srednja brzina elektrona tada je određena grupnom brzinom talasnog paketa:

$$v = \frac{d\nu}{d(1/\lambda)} = \frac{d\omega}{dk}; \quad \vec{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla E(\vec{k}), \quad (2.14)$$

gde je  $\nu = E/h$  - frekvencija.

Delovanjem spoljašnjeg električnog polja, odnosno spoljašnje sile, menja se energija elektrona u jedinici vremena, za iznos:

$$e\vec{F}\vec{v} = e\vec{F}\frac{1}{\hbar} \nabla E. \quad (2.15)$$

S druge strane, promena energije kao funkcije od  $\vec{k}$  će biti:

$$\frac{dE}{dt} = \nabla E \frac{d\vec{k}}{dt}. \quad (2.16)$$

Izjednačavanjem prethodna dva izraza dobija se da je:

$$\frac{d\vec{k}}{dt} = \frac{\vec{F}}{\hbar}. \quad (2.17)$$

Talasni vektor se u električnom polju menja kao za slobodni elektron za koji je impuls  $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ , pa jednačina (2.17) daje Njutnov zakon kretanja:  $\vec{p} = \vec{F}$ . Jednačina (2.14) strogo proizilazi iz razmatranja kretanja talasnog paketa pod delovanjem električne sile.

Ubrzanje elektrona će na osnovu izraza (2.14) biti:

$$\vec{a} = \frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{d}{dt} \left( \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial \vec{k}} \right) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 E}{\partial \vec{k} \partial \vec{k}} \frac{\partial \vec{k}}{\partial t}. \quad (2.18)$$

### 2.4. Tenzor recipročne efektivne mase

Kombinacijom izraza (2.17) i (2.18) sledi da je:

$$\vec{a} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial \vec{k} \partial \vec{k}} \vec{F} \equiv \frac{\vec{F}}{m^*}, \quad (2.19)$$

gde je veličina  $\frac{1}{m^*}$  tenzor recipročne efektivne mase. Elementi ovog tenzora određeni su odgovarajućim izvodima energije po komponentama talasnog vektora:

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial \vec{k} \partial \vec{k}} \equiv \frac{1}{\hbar^2} \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_y} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_z} \\ \frac{\partial^2 E}{\partial k_y \partial k_x} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_y^2} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_y \partial k_z} \\ \frac{\partial^2 E}{\partial k_z \partial k_x} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_z \partial k_y} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_z^2} \end{pmatrix} \quad (2.20)$$

U slučaju primitivne kubne rešetke, koja ima medjusobno normalne ose, jedinični vektori u smeru osa  $x, y, z$  redom, su označeni kao:  $\{\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3\} \rightarrow \vec{a}_1 = \vec{e}_1 a; \vec{a}_2 = \vec{e}_2 a; \vec{a}_3 = \vec{e}_3 a$ , gde je  $a$  - dužina ivice elementarne kocke, a izraz za talasni vektor je onda:

$$\vec{k} = 2\pi \left( \frac{n_1}{L_1} \vec{e}_1 + \frac{n_2}{L_2} \vec{e}_2 + \frac{n_3}{L_3} \vec{e}_3 \right); \quad L_i = N_i a; \quad i = x, y, z.$$

Uslov da vektor  $\vec{k}$  pripada redukovanim području je da njegove komponente budu odabране tako da važi:

$$-\frac{\pi}{a} < k_i < \frac{\pi}{a}; \quad i = x, y, z.$$

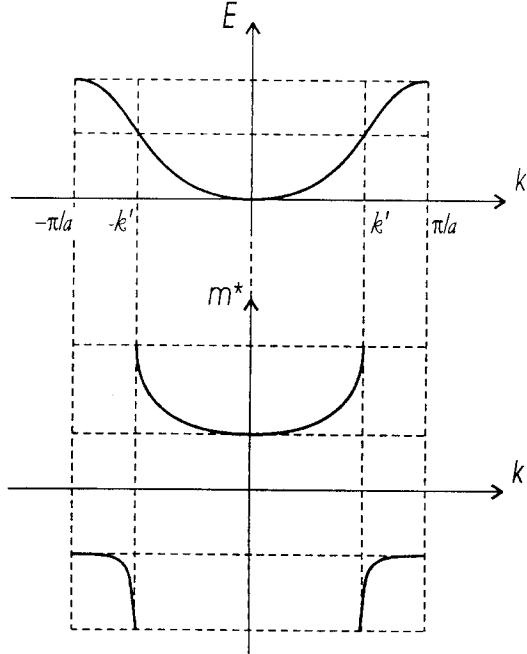
Za ovakvu rešetku tenzor recipročne efektivne mase je simetričan i ima medjusobno jednakе dijagonalne komponente. Ukoliko se ta osobina tenzora primeni na izraz (2.19), odnosno (2.1), dobija se disperzioni zakon slobodnog elektrona, ali sa efektivnom masom

$$E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}. \quad (2.21)$$

Smisao uvođenja efektivne mase sastoji se u tome da se složeni zakoni kretanja u kristalu mogu formalno svesti na zakone klasične fizike. Znači, podstavom efektivne mase je uračunato rezultujuće dejstvo periodičnog električnog polja na elektron.

Zavisno od zakrivljenosti energetske površine, efektivna masa može da bude negativna ili pozitivna (što odgovara elektronima ili šupljinama, respektivno). Ubrzanje nosioca nanelektrisanja u kristalnoj rešetki određeno je, ne slobodnom elektronskom masom, već skupom veličina (2.20) koje se menjaju pomeranjem elektronskog stanja u prostoru talasnog vektora. Efektivna masa elementarnih nosioca nanelektrisanja je pozitivna oko sredine, a negativna pri kraju redukovanih područja. Ovo može da se prikaže crtežom (slika 2.3).

Ove anomalne oblasti ( $m^* < 0$ ) mogu da se objasne posmatrajući kretanje elektrona pod dejstvom konstantnog spoljašnjeg električnog polja  $\vec{E}$ . Kako kretanje elektrona u kristalu ima oscilatorni karakter, oblasti negativne mase odgovaraju situaciji da se elektron usporava iako na njega deluje spoljašnja sila sa težnjom da mu poveća brzinu ( $k' < k < \frac{\pi}{a}$ ), odnosno ubrzava iako spoljašnja sila teži da mu smanji brzinu ( $-\frac{\pi}{a} < k < -k'$ ). Medutim, u toj oblasti faznog  $k$ -prostora negativno nanelektrisani elektron negativne mase može da se tretira kao pozitivno nanelektrisana čestica pozitivne mase - **šupljina** koja se kreće u skladu sa delovanjem polja:  $+e\vec{E}$ . Dakle, kretanje elektrona na krajevima zona može da se posmatra i kao kretanje pozitivno nanelektrisanih šupljina.



Slika 2.3: Promena energije i efektivne mase u  $\vec{k}$ -prostoru

## 2.5. Zakon disperzije elektrona

Sada ćemo razmotriti neka svojstva elektronskog podsistema idealnog beskonačnog kristala polazeći od hamiltonijana slobodnih elektrona koji u konfiguracionom prostoru ima oblik:

$$H = \sum_{\vec{n}} \Delta_{\vec{n}} a_{\vec{n}}^+ a_{\vec{n}} - \sum_{\vec{n}, \vec{m}} W_{\vec{n}, \vec{m}} a_{\vec{n}}^+ a_{\vec{m}}, \quad (2.22)$$

gde su  $a_{\vec{n}}^+$  i  $a_{\vec{n}}$  - kreacioni i anihilacioni operatori elektrona na čvoru  $\vec{n}$  rešetke. Veličine

$$\Delta_{\vec{n}} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}, \quad W_{\vec{n}, \vec{m}} = -\frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})} \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*},$$

predstavlja energiju elektrona lokalizovanog na čvoru  $\vec{n}$  i matrične elemente elektronskog transfera sa čvora  $\vec{n}$  na čvor  $\vec{m}$ , respektivno. Ovde je pretpostavljeno da je broj elektrona po atomu relativno mali (jedan elektron po atomu) tako da se Kulonova interakcija elektrona može zanemariti. U tom slučaju, lako se pokazuje da je hamiltonijan (2.22) ekvivalentan hamiltonijanu elektronskog gasa u aproksimaciji efektivne mase:

$$H = \sum_{\vec{k}} E_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}}, \quad E_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}. \quad (2.23)$$

Iz translacione invarijantnosti posmatranog idealnog kristala sledi periodičnost hamiltonijana (2.22) koja ima za posledicu da su:

$$\Delta_{\vec{n}} = \Delta, \quad W_{\vec{n}, \vec{m}} = W_{\vec{m}, \vec{n}} \equiv W; \quad \forall (\vec{n}, \vec{m}). \quad (2.24)$$

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

$$\begin{aligned} H = & \Delta \sum_{n_x n_y n_z} a_{n_x n_y n_z}^+ a_{n_x n_y n_z} - W \sum_{n_x n_y n_z} a_{n_x n_y n_z}^+ (a_{n_x+1, n_y n_z} + a_{n_x-1, n_y n_z} + \\ & + a_{n_x n_y+1, n_z} + a_{n_x n_y-1, n_z} + a_{n_x n_y n_z+1} + a_{n_x n_y n_z-1}) \end{aligned} \quad (2.25)$$

Izvršićemo Furije transformacije operatora kracije i anihilacije:

$$\begin{aligned} a_{n_x n_y n_z}^+ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{q_x q_y q_z} a_{q_x q_y q_z}^+ e^{-ia(q_x n_x + q_y n_y + q_z n_z)}, \\ a_{n_x n_y n_z} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k_x k_y k_z} a_{k_x k_y k_z} e^{ia(k_x n_x + k_y n_y + k_z n_z)}, \end{aligned}$$

gde je  $N = N_x N_y N_z$  - ukupan broj atoma (molekula). Ako se uzme u obzir da je

$$\sum_{n_x n_y n_z} e^{ia[(k_x - q_x)n_x + (k_y - q_y)n_y + (k_z - q_z)n_z]} = N_x N_y N_z \delta_{k_x q_x} \delta_{k_y q_y} \delta_{k_z q_z}, \quad (2.26)$$

tada hamiltonijan postaje (dijagonalan):

$$H = \sum_{k_x k_y k_z} [\Delta - 2W(\cos ak_x + \cos ak_y + \cos ak_z)] a_{k_x k_y k_z}^+ a_{k_x k_y k_z} \quad (2.27)$$

ili

$$H = \sum_{\vec{k}} E(\vec{k}) a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}}, \quad (2.28)$$

gde je

$$E(\vec{k}) = \Delta - 2W(\cos ak_x + \cos ak_y + \cos ak_z). \quad (2.29)$$

Ovaj izraz predstavlja zakon disperzije elektronskog sistema u idealnoj beskonačnoj prostoriji kubnoj strukturi. U slučaju slabo vezanih elektrona (degenerisan elektronski gas),  $\Delta = 6W$  pa je:

$$E_{\vec{k}} = 2W(3 - \cos ak_x - \cos ak_y - \cos ak_z),$$

gde je:  $1 - \cos ak_j = 2 \sin^2 \frac{ak_j}{2}$ , pa se dobija:

$$E_{\vec{k}} = 4W \left( \sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y}{2} + \sin^2 \frac{ak_z}{2} \right). \quad (2.30)$$

Ako se uzme u obzir da je za male talasne vektore:  $\frac{ak_j}{2} \ll 1 \Rightarrow \sin \frac{ak_j}{2} \approx \frac{ak_j}{2}$ , tada izraz (2.30) dobija oblik:

$$E_{\vec{k}} \approx Wa^2(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \equiv Wa^2 k^2. \quad (2.31)$$

Na osnovu (2.21) sledi:  $Wa^2 k^2 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$ , odnosno:

$$m^* = \frac{\hbar^2}{2a^2 W}. \quad (2.32)$$

Poslednji izraz predstavlja efektivnu masu u dugotalasnoj aproksimaciji. Recipročna vrednost biće:  $\frac{1}{m^*} = \frac{2a^2 W}{\hbar^2}$ , što zbog tenzorskog karaktera efektivne mase možemo pisati:

$$\frac{1}{m^*} = \frac{2a^2 W}{\hbar^2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.33)$$

### 3. Visokotemperaturski superprovodnici

U naučnoj i tehničkoj javnosti, 1987. se smatra godinom superprovodnosti<sup>5</sup>. Naime, početkom te godine su sintetisani superprovodni materijali sa kritičnom temperaturom prelaza u superprovodno stanje iznad temperature tečnog azota (77 K), što pruža mogućnost da primena superprovodnih materijala bude ekonomski isplativa, čak i u proizvodima za široku potrošnju. Ovim temperaturama dovedena je u pitanje tvrdnja o postojanju isključivo fononskog mehanizma kod superprovodnika, prema čemu je procena najviše  $T_c \sim 30$  K. Sinteza visokotemperaturnih materijala sa  $T_c > 77$  K predstavlja početak nove tehnološke revolucije, a smatra se da će njihovom primenom doći do većih promena u tehničkom i tehnološkom smislu, nego što je to učinila poluprovodnička i mikroelektronska tehnologija.

Prvi rad iz oblasti superprovodnih keramičkih materijala publikovan je 1975. godine, kada su Slejt i njegovi saradnici sintetisali uzorak  $BaPb_{1-x}Bi_xO_3$  sa perovskitnom strukturom kritične temperaturu 13 K. Veliki prodor u oblasti visokotemperaturnih superprovodnih materijala načinili su rezultati švajcarskih naučnika Bednorca i Milera koji su sintetisali potpuno novi superprovodni materijal na bazi  $Ba - La - Cu - O$  ( $Ba_xLa_{2-x}CuO_{4-y}$ , gde je  $x > 1$  i  $y > 0$ ) sa kritičnom temperaturom od oko 30 K. Nakon ovog zaista istorijskog rada, niz istraživača započinje svoje eksperimente na sistemima ( $La -$ ) $Ba - Cu - O$  sa različitim stehiometrijskim sastavom, uslovima sinteze (atmosfera kiseonika, vakuum, vazduh) pri različitim temperaturama i vremenima sinterovanja. Tako je januara 1987. Ču sa saradnicima sintetizovao materijal, na bazi pomenutog sistema, sa  $T_c \approx 40$  K. Satarola sintetiše niz superprovodnih materijala nestehiometrijskog sastava na osnovu oksida lantana i bakra sa stroncijum karbonatom. Tačka prelaza u superprovodno stanje za sisteme  $La_{2-x}Sr_xCuO_4$  i  $x \leq 3$  iznosila je preko 36 K. U toku procesa sinteze bilo je neophodno prisustvo kiseonika zbog presudnog uticaja na formiranje valentnih veza kod bakra. Slične rezultate saopštavaju i japanski istraživači, sa temperaturom prelaza oko 30 K. Početkom 1987. godine Ču sa saradnicima je sintetisao uzorke novog superprovodnog materijala, koji je sadržao itrijum, barijum i bakar u sistemu  $Y - Ba - Cu - O$ , sa kritičnom temperaturom oko 95 K. Dobijeni uzorci su bili različitog stehiometrijskog sastava od ( $Y_{1.2}Ba_{0.8}CuO_{4-y}$  do  $Y_{0.6}Ba_{0.4}CuO_{3-y}$ ), a njihova boja se menjala u zavisnosti od kompozicije i uslova odgrevanja. U januaru u 1988. na Cukuba univerzitetu u Japanu otkrivena je superprovodnost na 110 K bez elemenata retkih zemalja na bazi bizmut-kalcijum-stroncijum-bakar-oksida, složenog hemijskog sastava. Ove keramike se veoma lako sintetizuju, jeftinije su i imaju bolja mehanička svojstva od keramika na bazi retkih zemalja. Mesec dana kasnije Parkin i saradnici iz Kalifornije pronalaze superprovodnost na temperaturi od 127 K sistema  $Tl_2Ca_2Ba_2Cu_3O_{10}$ , ali njegov nedostatak je u tome što je neophodna složena aparatura za zaštitu od otrovnog talijuma. Nedavno (1993.) otkrivene su dve grupe superprovodnih materijala za koje se smatra da će imati značajnijeg uticaja na buduće tehnološke primene. Naime, najnovija istraživanja na  $Hg - Ba - Ca - Cu - O$  sistemu pokazuju porast kritične temperature do 135 K, dok se kod  $HgBa_2Ca_2Cu_3O_8$

<sup>5</sup>Ovo je treća godina superprovodnosti. Prva je bila 1911. (K. Onovo otkriće superprovodnosti), a druga 1957. (BCS objašnjenje superprovodnosti).

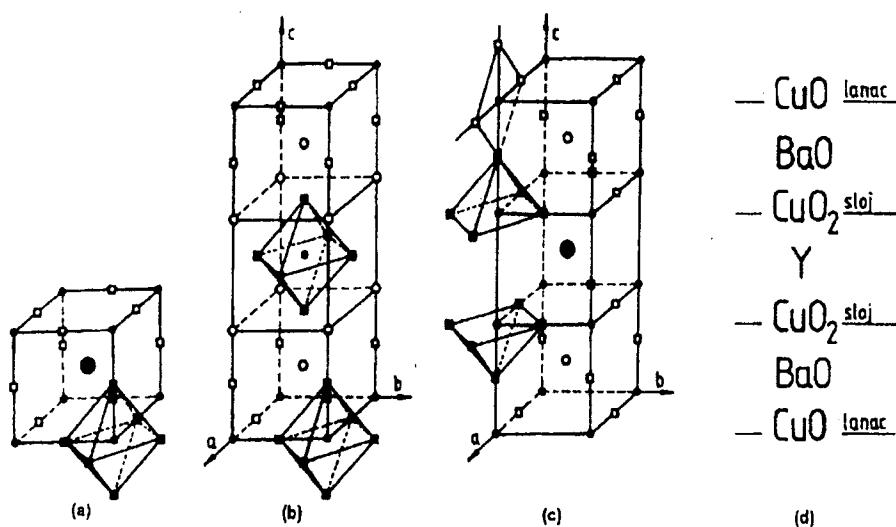
povećava na 164 K, pri hidrostatičkom pritisku od 31 GPa. Veliku pažnju izazvalo je i otkriće superprovodnosti u sistemima  $Re - M - B - C$  ( $Re$  - elementi retkih zemalja,  $M$  -  $Pd$ ,  $Ni$ ), sa kritičnom temperaturom 23 K za  $YPd_5B_3C_{0.3}$ , zbog činjenice da se relativno visoka vrednost kritične temperature može očekivati i u materijalima bez bakra i kiseonika.

Iz napred izloženog vidi se da su visokotemperaturski superprovodni materijali - keramike na bazi  $CuO$ , ali sinterovani i dopirani teškim elementima:  $La$ ,  $Ba$ ,  $Y$ ,  $Ca$ ,  $Tl$ ,  $Bi$ , ... u različitim koncentracijama. Već je i ranije uočeno da slab provodnici ili čak i izolatori (na sobnim temperaturama) imaju mnogo bolje superprovodne karakteristike od (dobrih) metalnih provodnika. Otuda interes za oksidima (ili čak sulfidima), ali iz treće grupe elemenata jer oni poseduju dosta veliku koncentraciju slabo vezanih elektrona koji možda imaju odlučujuću ulogu u superprovodjenju. Koliko je ovo iznenadjujuće isto toliko je iznenadjujuća činjenica da samo neznatne promene fizičkih uslova ili hemijskog sastava mogu potpuno da promene prirodu materijala. Tako neki uzorci mogu da budu feromagnetići ili poluprovodnici, drugi izolatori ili feroelektrići, sve u zavisnosti od njihove izrade. Zbog toga su keramika tipa lantana imale  $T_c$  oko 40 K, a zamenom lantana itrijumom sve do oko 100 K.

Posle otkrića ovih superprovodnih materijala nadjeno je da su to višefazni uzorci, pa se postavljalo pitanje koja od ovih faza je superprovodna. Za analizu faznog sastava i ispitivanja kristalne strukture korišćene su različite metode rendgeno-strukturne kristalografije. Kristalna struktura do sada poznatih visokotemperaturnih oksidnih superprovodnih materijala nastala je modifikacijom kristalne strukture tipa prirodnog mineraла perovskita  $CaTiO_3$ , (radi se o kubnoj kristalnoj strukturi, slika 3.1a). Zajedničko za sva ova jedinjenja je da imaju dvodimenzionu ili slojevitu strukturu. Elementarna celija im je tetragonalna ili ortorombična, pri čemu su  $a$  i  $b$  parametri približno jednake dužine, dok je  $c$  parametar nekoliko puta veći. Nasuprot ranije poznatim superprovodnicima, keramika je jako izotropna, što znači da kritična gustina struje varira i to radikalno od toga kojim pravcem struja teče kroz kristale. Kritično polje keramike se takođe menja u zavisnosti od orijentacije primjenjenog polja. Primećeno je da znatno veće gustine struja teku u  $a$ ,  $b$  ravni nego po  $c$ -osi. To je i bio razlog zašto su istraživači nastojali da izgrade uzorce u vidu tankih filmova kod kojih struja teče normalno na  $c$ -osu (u  $a$ ,  $b$  ravni).

Osnovni izgradjivački element kristalne strukture keramika su  $CuO_6$  oktaedri koji su međusobno spojeni preko zajedničkih rogljeva u  $ab$ -ravni, pri čemu se formira slojevita struktura (slika 3.1b - struktura lantanovih keramika). Pored bakar-oksidnih slojeva neke od keramika (itrijumove) sadrže i lance bakar-oksida (slike 3.1 c i d). Sve to ima za posledicu značajnu anizotropiju mnogih osobina keramika (kritična gustina struje varira u zavisnosti od toga kojim pravcem stupa struja teče kroz kristale, kritično polje se menja u zavisnosti od orijentacije primjenjenog polja itd.). Izmedju slojeva nalaze se međuslojne oblasti koje, pored toga što stabilizuju kristalnu strukturu, imaju i ulogu „rezervoara“ nosilaca nanelektrisanja. Naime, referentna jedinjenja  $La_2CuO_4$  i  $YBa_2Cu_3O_6$  su poluprovodnici kod kojih joni bakra ( $Cu^{2+}$ ) u  $CuO_2$  sloju imaju  $d^9$  konfiguraciju i antiferomagnetno su spregnuti sa susednim jonica bakra. Dodavanje nosilaca  $CuO_2$  sloju (kod  $La_2CuO_4$ ), čime on najpre postaje provodan, a zatim superprovodan, vrši se supstitucijom trovalentnih  $La^{3+}$  atoma dvovalentnim  $Sr^{2+}$ , odnosno dodavanjem kiseonika  $YBa_2Cu_3O_6$ , što rezultira formiranjem  $CuO$  lanaca kod  $YBa_2Cu_3O_7$ . Da bi se ponovo postigla električna neutralnost u uzorku, dolazi do transfera elektrona iz  $CuO_2$  ravni, tako da slojevi postaju

provodni, pri čemu su nosioci nanelektrisanja šupljine (svi visokotemperaturski oksidni superprovodnici, osim  $Nd_{1-x}Ce_xCuO_4$  su p-tipa). Na bazi dosadašnjih eksperimentalnih rezultata može se zaključiti da dodavanje nosilaca iz „rezervoara” u  $CuO_2$  ravni značajno povećava provodnost ab-ravni. Međutim, kritična temperatura dostiže maksimum samo pri optimalnom dopiranju. Dalje povećanje dopiranja snižava kritičnu temperaturu i superprovodnost iščezava pri koncentraciji od 0.3 šupljine po atomu bakra u  $CuO_2$  sloju. Zanimljivo je napomenuti da su oksidi  $Bi - Sr - Ca - Cu - O$  veoma stabilni u vodi i na vazduhu i da nisu primećene nikakve promene u superprovodnim osobinama čak i nakon sprovodenja termičkog ciklusa izmedju 4 K i sobne temperature. Pretpostavlja se da bi ovaj oksid mogao znatno da doprinese razrešavanju mehanizma visokotemperaturske superprovodnosti.



**Slika 3.1:** Kristalne strukture oksidnih keramika

Perspektiva primene visokotemperaturskih superprovodnih materijala je značajna pre svega jer zamena helijuma kao rashladnog sredstva tečnim azotom ima mnogostrukе prednosti. Malo je verovatno da će u skoroj budućnosti ovi materijali imati primenu za transport i akumulaciju električne energije, ali se njihova odlučujuća ulog već sada vidi u području primene kao sastavnih delova za izradu elemenata opreme jakih magneta, zatim senzora, pa brzih analogno-digitalnih pretvarača i prekidača. Jaka magnetna polja potrebna su za fundamentalna naučna istraživanja u fizici (npr. kod akceleracije i separacije elementarnih čestica ili za ostvarivanje kontrolisane fuzije), u medicini (za magnetne skenere ili NMR-tomografiju), u industriji (za MHD), u saobraćaju (levitacioni transport) itd. Magnetni senzori (SQUID - uredjaji) već imaju primenu u mnogim oblastima nauke i sa klasičnim superprovodnicima, ali bi sa novim ovo trebalo da bude efikasnije i ekonomičnije.

## 4. Elektronski spektri idealnih film-struktura

### 4.1. Model elektronskog filma

Hamiltonian jako vezanih elektrona u tankim kristalnim filmovima možemo formirati polazeći od „balkovskog“ hamiltonijana koji u aproksimaciji najbližih suseda ima oblik:

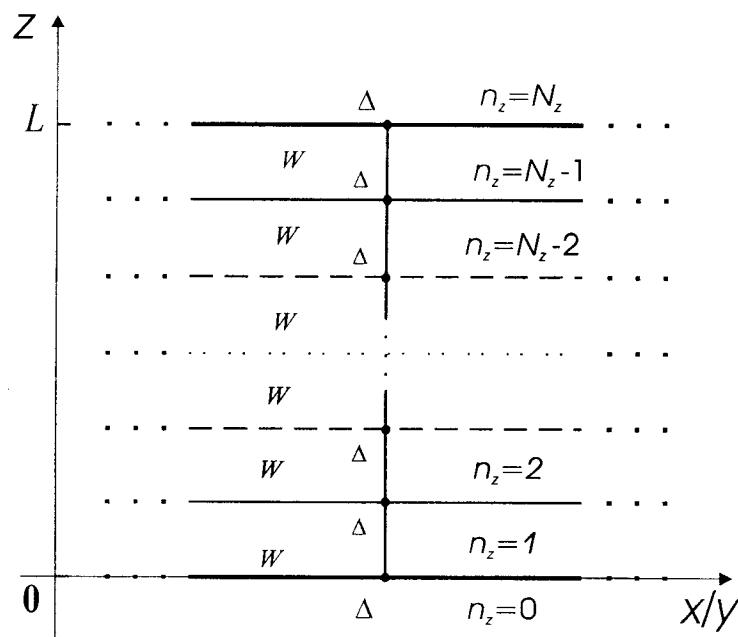
$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{n_x n_y n_z} \Delta_{n_x n_y n_z} a_{n_x n_y n_z}^+ a_{n_x n_y n_z} - \sum_{n_x n_y n_z} a_{n_x n_y n_z}^+ \times \\
 & \times \left( W_{n_x n_y n_z; n_x+1, n_y, n_z} a_{n_x+1, n_y, n_z} + W_{n_x n_y n_z; n_x-1, n_y, n_z} a_{n_x-1, n_y, n_z} + \right. \\
 & + W_{n_x n_y n_z; n_x n_y+1, n_z} a_{n_x n_y+1, n_z} + W_{n_x n_y n_z; n_x n_y-1, n_z} a_{n_x n_y-1, n_z} + \\
 & \left. + W_{n_x n_y n_z; n_x n_y n_z+1} a_{n_x n_y n_z+1} + W_{n_x n_y n_z; n_x n_y n_z-1} a_{n_x n_y n_z-1} \right). \quad (4.1)
 \end{aligned}$$

Fermionski operatori  $a_{\vec{n}}^+$  i  $a_{\vec{n}}$ , kreiraju i anihiliraju elektrone na atomu čiji je položaj određen vektorom rešetke  $\vec{n} = n_x \vec{i} + n_y \vec{j} + n_z \vec{k}$ . Pošto su granične površine filma uzete normalno na  $z$ -pravac, indeks sloja  $n_z$  u (4.1) - uzima vrednosti

$$n_z = 0, 1, 2, \dots, N_z,$$

gde je  $N_z \in [2, 20]$  kod ultratankih filmova. Indeksi  $n_x$  i  $n_y$ , koji određuju položaj atoma u svakom sloju mogu imati proizvoljne celobrojne vrednosti (od  $-\infty$ , do  $+\infty$ ).

Realni kristali za razliku od idealnih beskonačnih struktura, ne poseduju osobinu translacijske invarijantnosti. Postojanje izvesnih graničnih uslova, jedan je od uzroka narušenja simetrije. Sistemi koji imaju dve paralelne granične površine nazivaju se filmovima.



Slika 4.1: Presek kristalnog uzorka u  $X(Y)Z$  - ravnini

Posmatra se idealni tanki film kubne kristalne strukture, načinjen na substratu nekim tehničko-tehnološkim postupkom (naparavanjem, spaterovanjem i sl.). Pojam idealni film koristi se u smislu nenarušenja kristalne strukture (bez prisustva defekata, primesa i sl.), a ne u smislu prostorne neograničenosti. Dimenzije filma su takve da je on u  $XY$  ravnima beskonačan, a u  $z$  pravcima ima konačnu debljinu ( $L$ ). Znači da ovaj film poseduje dve beskonačne granične površine paralelne  $XY$  ravnima i to za:  $z = 0$  i  $z = L$ .

Razmatraćemo analitički rešiv slučaj koji odgovara film-strukturi koja je „isečena“ iz beskonačne. Zbog postojanja granica filma uzećemo da je energija elektrona oblika:

$$\begin{aligned}\Delta_{n_x n_y n_z} &= 0 \quad \text{za } n_z < 0 \text{ i } n_z > N_z, \\ \Delta_{n_x n_y n_z} &= \Delta \quad \text{za } 0 \leq n_z \leq N_z.\end{aligned}\quad (4.2)$$

a matrični elementi elektronskog preskoka sa sloja na sloj su:

$$\begin{aligned}W_{n_x n_y 0; n_x n_y n_z} &= 0 \quad \text{za } n_z < 0, \\ W_{n_x n_y N_z; n_x n_y n_z} &= 0 \quad \text{za } n_z > N_z, \\ W_{n_x n_y n_z; n_x n_y, n_z+1} &= W \quad \text{za } 0 \leq n_z \leq N_z - 1, \\ W_{n_x n_y n_z; n_x n_y, n_z-1} &= W \quad \text{za } 1 \leq n_z \leq N_z,\end{aligned}\quad (4.3)$$

pri čemu je za svaki sloj,

$$W_{n_x n_y n_z; n_x \pm 1, n_y n_z} = W_{n_x n_y n_z; n_x n_y \pm 1, n_z} \equiv W, \quad (4.4)$$

gde je  $W$  - konstanta elektronskog transvera idealnog kristala.

Elektronski hamiltonijan tankih kristalnih filmova možemo napisati u obliku:

$$H = H_z + H_p, \quad (4.5)$$

gde su:

$$H_z = \sum_{n_x n_y} \sum_{n_z=1}^{N_z-1} a_{n_x n_y n_z}^+ \left[ \Delta a_{n_x n_y n_z} - W (a_{n_x+1, n_y n_z} + a_{n_x-1, n_y n_z} + a_{n_x n_y+1, n_z} + a_{n_x n_y-1, n_z}) \right]; \quad (4.6)$$

$$\begin{aligned}H_p &= \sum_{n_x n_y} \left[ a_{n_x n_y 0}^+ (\Delta a_{n_x n_y 0} - W a_{n_x n_y 1}) + a_{n_x n_y N_z}^+ (\Delta a_{n_x n_y N_z} - W a_{n_x n_y N_z-1}) - \right. \\ &\quad \left. - W a_{n_x n_y 0}^+ (a_{n_x+1, n_y 0} + a_{n_x-1, n_y 0} + a_{n_x n_y+1, 0} + a_{n_x n_y-1, 0}) - W a_{n_x n_y N_z}^+ (a_{n_x+1, n_y N_z} + a_{n_x-1, n_y N_z} + a_{n_x n_y+1, N_z} + a_{n_x n_y-1, N_z}) \right].\end{aligned}\quad (4.7)$$

## 4.2. Jednočestična stanja elektrona u filmu

Potražićemo sada jednočestičnu talasnu funkciju  $|\Psi_1\rangle$  za elektrone u filmu, koju pišemo u obliku:

$$|\Psi_1\rangle = \sum_{n_x n_y n_z} A_{n_x n_y n_z} a_{n_x n_y n_z}^+ |0\rangle. \quad (4.8)$$

Iz uslova ortogonalnosti  $\langle\Psi_1 | \Psi_1\rangle = 1$  sledi:

$$\sum_{n_x n_y n_z} A_{n_x n_y n_z}^* A_{n_x n_y n_z} = 1. \quad (4.9)$$

Hajzenbergova jednačina kretanja za operator  $a_{m_x m_y m_z}$  glasi:

$$i\hbar \frac{da_{m_x m_y m_z}}{dt} = [a_{m_x m_y m_z}, H]. \quad (4.10)$$

Ako je  $a_{m_x m_y m_z}(t) = a_{m_x m_y m_z}(0) e^{-i\omega t}$ , a energija sistema  $E = \hbar\omega$  dobija se:

$$E a_{m_x m_y m_z} - [a_{m_x m_y m_z}, H] = 0_{m_x m_y m_z}. \quad (4.11)$$

Na osnovu ove jednačine sledi:

$$(E a_{m_x m_y m_z} - [a_{m_x m_y m_z}, H]) | \Psi_1 \rangle = 0. \quad (4.12)$$

Najpre ćemo računati komutatore:  $\hat{C}_{\vec{m}} = [a_{\vec{m}}, H]$ . Za njihovo izračunavanje koristićemo standardne fermionske komutatorske relacije:

$$\{a_{\vec{n}}, a_{\vec{m}}^+\} = \delta_{\vec{n}\vec{m}}, \quad \{a_{\vec{n}}, a_{\vec{m}}\} = \{a_{\vec{n}}^+, a_{\vec{m}}^+\} = 0 \quad (4.13)$$

Zgodno je da  $H_z$  napišemo kao sumu:

$$H_z = H_1 - \sum_{\nu=2}^7 H_{\nu}, \quad (4.14)$$

gde su:

$$\begin{aligned} H_1 &= \Delta \sum_{n_x n_y} \sum_{n_z=1}^{N_z-1} a_{n_x n_y n_z}^+ a_{n_x n_y n_z}; \\ H_2 &= W \sum_{n_x n_y} \sum_{n_z=1}^{N_z-1} a_{n_x n_y n_z}^+ a_{n_x+1, n_y n_z}; \quad H_3 = W \sum_{n_x n_y} \sum_{n_z=1}^{N_z-1} a_{n_x n_y n_z}^+ a_{n_x-1, n_y n_z}; \\ H_4 &= W \sum_{n_x n_y} \sum_{n_z=1}^{N_z-1} a_{n_x n_y n_z}^+ a_{n_x n_y+1, n_z}; \quad H_5 = W \sum_{n_x n_y} \sum_{n_z=1}^{N_z-1} a_{n_x n_y n_z}^+ a_{n_x n_y-1, n_z}; \\ H_6 &= W \sum_{n_x n_y} \sum_{n_z=1}^{N_z-1} a_{n_x n_y n_z}^+ a_{n_x n_y n_z+1}; \quad H_7 = W \sum_{n_x n_y} \sum_{n_z=1}^{N_z-1} a_{n_x n_y n_z}^+ a_{n_x n_y n_z-1}. \end{aligned} \quad (4.15)$$

Na osnovu toga sledi:

$$\begin{aligned} \hat{C}_1 &= [a_{\vec{m}}, H_1] = \Delta \sum_{n_x n_y} \sum_{n_z=1}^{N_z-1} [a_{m_x m_y m_z}, a_{n_x n_y n_z}^+ a_{n_x n_y n_z}] = \\ &= \Delta \sum_{n_x n_y} \sum_{n_z=1}^{N_z-1} \left( a_{n_x n_y n_z}^+ (a_{m_x m_y m_z} a_{n_x n_y n_z} - a_{n_x n_y n_z} a_{m_x m_y m_z}) + \right. \\ &\quad \left. + (a_{m_x m_y m_z} a_{n_x n_y n_z}^+ - a_{n_x n_y n_z}^+ a_{m_x m_y m_z}) a_{n_x n_y n_z} \right). \end{aligned}$$

Koristeći komutacione relacije (4.13) u obliku:  $a_{n_x n_y n_z} a_{m_x m_y m_z} = -a_{m_x m_y m_z} a_{n_x n_y n_z}$ ; i  $a_{n_x n_y n_z}^+ a_{m_x m_y m_z} = \delta_{n_x m_x} \delta_{n_y m_y} \delta_{n_z m_z} - a_{m_x m_y m_z} a_{n_x n_y n_z}^+$  dobijamo:

$$\begin{aligned} \hat{C}_1 &= \Delta \sum_{n_x n_y} \sum_{n_z=1}^{N_z-1} \left[ a_{n_x n_y n_z}^+ 2 a_{m_x m_y m_z} a_{n_x n_y n_z} + \right. \\ &\quad \left. + (\delta_{n_x m_x} \delta_{n_y m_y} \delta_{n_z m_z} - a_{n_x n_y n_z}^+ a_{m_x m_y m_z} - a_{n_x n_y n_z}^+ a_{m_x m_y m_z}) a_{n_x n_y n_z} \right] = \\ &= \Delta \sum_{n_x n_y} \sum_{n_z=1}^{N_z-1} \left( 2 a_{n_x n_y n_z}^+ a_{m_x m_y m_z} a_{n_x n_y n_z} - 2 a_{n_x n_y n_z}^+ a_{m_x m_y m_z} a_{n_x n_y n_z} + \right. \\ &\quad \left. + \delta_{n_x m_x} \delta_{n_y m_y} \delta_{n_z m_z} a_{n_x n_y n_z} \right) = \Delta \sum_{n_x n_y} \sum_{n_z=1}^{N_z-1} \delta_{n_x m_x} \delta_{n_y m_y} \delta_{n_z m_z} a_{n_x n_y n_z}. \end{aligned}$$

Poznato je da  $\delta_{\vec{n}\vec{m}}$  „skida“ sumu po  $\vec{n}$  i svako  $n_j \rightarrow m_j$ ,  $j = x, y, z$  te se konačno dobija

$$\hat{C}_1 = \Delta a_{m_x m_y m_z} . \quad (4.16)$$

Analognim računskim postupkom dobijamo ostale komutatore:

$$\begin{aligned} \hat{C}_2 &= [a_{\vec{m}}, H_2] = W a_{m_x+1, m_y m_z} ; & \hat{C}_3 &= [a_{\vec{m}}, H_3] = W a_{m_x-1, m_y m_z} ; \\ \hat{C}_4 &= [a_{\vec{m}}, H_4] = W a_{m_x m_y+1, m_z} ; & \hat{C}_5 &= [a_{\vec{m}}, H_5] = W a_{m_x m_y-1, m_z} ; \\ \hat{C}_6 &= [a_{\vec{m}}, H_6] = W a_{m_x m_y m_z+1} ; & \hat{C}_7 &= [a_{\vec{m}}, H_7] = W a_{m_x m_y m_z-1} . \end{aligned} \quad (4.17)$$

Površinski hamiltonijan (4.7) je „odgovoran“ za:  $n_z = Q N_z$  i možemo ga pisati kao:

$$H_p = H_8 - \sum_{\nu=9}^{13} H_\nu + H_{14} - \sum_{\nu=15}^{19} H_\nu , \quad (4.18)$$

gde su:

$$\begin{aligned} H_8 &= \Delta \sum_{n_x n_y} a_{n_x n_y 0}^+ a_{n_x n_y 0} ; & H_9 &= W \sum_{n_x n_y} a_{n_x n_y 0}^+ a_{n_x+1, n_y 0} ; \\ H_{10} &= W \sum_{n_x n_y} a_{n_x n_y 0}^+ a_{n_x-1, n_y 0} ; & H_{11} &= W \sum_{n_x n_y} a_{n_x n_y 0}^+ a_{n_x n_y+1, 0} ; \\ H_{12} &= W \sum_{n_x n_y} a_{n_x n_y 0}^+ a_{n_x, n_y-1, 0} ; & H_{13} &= W \sum_{n_x n_y} a_{n_x n_y 0}^+ a_{n_x n_y 1} ; \\ H_{14} &= \Delta \sum_{n_x n_y} a_{n_x n_y N_z}^+ a_{n_x n_y N_z} ; & H_{15} &= W \sum_{n_x n_y} a_{n_x n_y N_z}^+ a_{n_x+1, n_y N_z} ; \\ H_{16} &= W \sum_{n_x n_y} a_{n_x n_y N_z}^+ a_{n_x-1, n_y N_z} ; & H_{17} &= W \sum_{n_x n_y} a_{n_x n_y N_z}^+ a_{n_x n_y+1, N_z} ; \\ H_{18} &= W \sum_{n_x n_y} a_{n_x n_y N_z}^+ a_{n_x n_y-1, N_z} ; & H_{19} &= W \sum_{n_x n_y} a_{n_x n_y N_z}^+ a_{n_x n_y N_z-1} . \end{aligned} \quad (4.19)$$

U ovom slučaju komutatori su:

$$\begin{aligned} \hat{C}_8 &= \Delta a_{m_x m_y 0} ; & \hat{C}_9 &= W a_{m_x+1, m_y 0} ; \\ \hat{C}_{10} &= W a_{m_x-1, m_y 0} ; & \hat{C}_{11} &= W a_{m_x m_y+1, 0} ; \\ \hat{C}_{12} &= W a_{m_x m_y-1, 0} ; & \hat{C}_{13} &= W a_{m_x m_y 1} ; \\ \hat{C}_{14} &= \Delta a_{m_x m_y N_z} ; & \hat{C}_{15} &= W a_{m_x+1, m_y N_z} ; \\ \hat{C}_{16} &= W a_{m_x-1, m_y N_z} ; & \hat{C}_{17} &= W a_{m_x m_y+1, N_z} ; \\ \hat{C}_{18} &= W a_{m_x m_y-1, N_z} ; & \hat{C}_{19} &= W a_{m_x m_y N_z-1} . \end{aligned} \quad (4.20)$$

Formiraćemo jednačinu za talasnu funkciju u obliku:

$$\begin{aligned} |\Psi_1\rangle &= \sum_{n_x n_y n_z} A_{n_x n_y n_z} a_{n_x n_y n_z}^+ |0\rangle = \\ &= \frac{1}{N} \sum_{n_x n_y n_z} \sum_{k_x k_y} A_{n_z} e^{ia(k_x n_x + k_y n_y)} a_{n_x n_y n_z}^+ |0\rangle , \end{aligned} \quad (4.21)$$

gde je  $N = N_x N_y$ . Na osnovu toga jednačinu (4.12) možemo pisati u obliku:

$$\left( E a_{m_x m_y m_z} - \sum_{i=1}^{19} \hat{C}_i \right) \frac{1}{N} \sum_{n_x n_y n_z} \sum_{k_x k_y} A_{n_z} e^{ia(k_x n_x + k_y n_y)} a_{n_x n_y n_z}^+ |0\rangle = 0 . \quad (4.22)$$

Rešavanjem ove jednačine za vrednosti kvantnih brojeva u intervalu  $0 \leq m_z \leq N_z$  dobićemo sistem homogenih diferencnih jednačina. Treba naglasiti da će za dati kvantni broj  $m_z$  u jednačini na talasnu funkciju stanja delovati samo njemu odgovarajući komutatori.

Tako na primer za  $m_z = 0$  na talasnu funkciju deluju komutatori od  $\hat{C}_8$  do  $\hat{C}_{13}$ , tako da je jednačina (4.22) oblika:

$$\begin{aligned} [Ea_{m_x m_y 0} - \Delta a_{m_x m_y 0} + W(a_{m_x+1, m_y 0} + a_{m_x-1, m_y 0} + \\ + a_{m_x m_y +1, 0} + a_{m_x m_y -1, 0} + a_{m_x m_y 1})] \times \\ \times \frac{1}{N} \sum_{n_x n_y n_z} \sum_{k_x k_y} A_{n_z} e^{ia(k_x n_x + k_y n_y)} a_{n_x n_y n_z}^+ |0\rangle = 0, \end{aligned}$$

odnosno:

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \sum_{n_x n_y n_z} \sum_{k_x k_y} A_{n_z} e^{ia(k_x n_x + k_y n_y)} [(E - \Delta) a_{m_x m_y 0} a_{n_x n_y n_z}^+ + \\ + W(a_{m_x+1, m_y 0} a_{n_x n_y n_z}^+ + a_{m_x-1, m_y 0} a_{n_x n_y n_z}^+ + a_{m_x m_y +1, 0} a_{n_x n_y n_z}^+ + \\ + a_{m_x m_y -1, 0} a_{n_x n_y n_z}^+ + a_{m_x m_y 1} a_{n_x n_y n_z}^+) |0\rangle = 0. \end{aligned}$$

Primenom komutatorskih relacija (4.13) dalje sledi:

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \sum_{k_x k_y} e^{ia(k_x m_x + k_y m_y)} [A_0(E - \Delta) + WA_0(e^{ik_x} + \\ + e^{-ik_x} + e^{ik_y} + e^{-ik_y}) + WA_1] |0\rangle = 0, \end{aligned}$$

pa se konačno dobija:

$$A_0 [E - \Delta + 2W(\cos ak_x + \cos ak_y)] + WA_1 = 0. \quad (4.23)$$

U slučaju  $m_z = 1$  dejstvuju komutatori od  $\hat{C}_1$  do  $\hat{C}_7$ , pa je jednačina (4.22) oblika:

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \sum_{n_x n_y n_z} \sum_{k_x k_y} A_{n_z} e^{ia(k_x n_x + k_y n_y)} [(E - \Delta) a_{m_x m_y 1} a_{n_x n_y n_z}^+ + \\ + W(a_{m_x+1, m_y 1} a_{n_x n_y n_z}^+ + a_{m_x-1, m_y 1} a_{n_x n_y n_z}^+ + a_{m_x m_y +1, 1} a_{n_x n_y n_z}^+ + \\ + a_{m_x m_y -1, 1} a_{n_x n_y n_z}^+ + a_{m_x m_y 2} a_{n_x n_y n_z}^+ + a_{m_x m_y 0} a_{n_x n_y n_z}^+) |0\rangle = 0 \end{aligned}$$

ili

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \sum_{k_x k_y} e^{ia(k_x m_x + k_y m_y)} [A_1(E - \Delta) + WA_1(e^{ik_x} + \\ + e^{-ik_x} + e^{ik_y} + e^{-ik_y}) + WA_2 + WA_0] |0\rangle = 0, \end{aligned}$$

odakle se dobija:

$$A_1 [E - \Delta + 2W(\cos ak_x + \cos ak_y)] + WA_2 + WA_0 = 0. \quad (4.24)$$

U opštem slučaju kada je  $0 < m_z < N_z$  dejstvuju komutatori od  $\hat{C}_1$  do  $\hat{C}_7$  i stavićemo da je  $m_z = l_z$ , pa sledi:

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \sum_{n_x n_y n_z} \sum_{k_x k_y} A_{n_z} e^{ia(k_x n_x + k_y n_y)} [(E - \Delta) a_{m_x m_y l_z} a_{n_x n_y n_z}^+ + \\ + W(a_{m_x+1, m_y l_z} a_{n_x n_y n_z}^+ + a_{m_x-1, m_y l_z} a_{n_x n_y n_z}^+ + a_{m_x m_y +1, l_z} a_{n_x n_y n_z}^+ + \\ + a_{m_x m_y -1, l_z} a_{n_x n_y n_z}^+ + a_{m_x m_y l_z +1} a_{n_x n_y n_z}^+ + a_{m_x m_y l_z -1} a_{n_x n_y n_z}^+) |0\rangle = 0, \end{aligned}$$

odnosno:

$$\frac{1}{N} \sum_{k_x k_y} e^{ia(k_x m_x + k_y m_y)} [A_{l_z} (E - \Delta) + W A_{l_z} (e^{iak_x} + e^{-iak_x} + e^{iak_y} + e^{-iak_y}) + W A_{l_z+1} + W A_{l_z-1}] |0\rangle = 0 ,$$

odakle se dobija:

$$A_{l_z} [E - \Delta + 2W (\cos ak_x + \cos ak_y)] + W A_{l_z+1} + W A_{l_z-1} = 0 . \quad (4.25)$$

Analognim računskim postupkom kao u prethodnom slučaju za  $m_z = N_z - 1$  dobija se:

$$A_{N_z-1} [E - \Delta + 2W (\cos ak_x + \cos ak_y)] + W A_{N_z} + W A_{N_z-2} = 0 . \quad (4.26)$$

U slučaju  $m_z = N_z$  na funkciju stanja dejstvuju komutatori od  $\hat{C}_{14}$  do  $\hat{C}_{19}$ , te sledi:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{N} \sum_{n_x n_y n_z} \sum_{k_x k_y} A_{n_z} e^{ia(k_x n_x + k_y n_y)} [(E - \Delta) a_{m_x m_y N_z} a_{n_x n_y n_z}^+ + \\ & + W (a_{m_x+1, m_y N_z} a_{n_x n_y n_z}^+ + a_{m_x-1, m_y N_z} a_{n_x n_y n_z}^+ + a_{m_x m_y+1, N_z} a_{n_x n_y n_z}^+ + \\ & + a_{m_x m_y-1, N_z} a_{n_x n_y n_z}^+ + a_{m_x m_y N_z-1} a_{n_x n_y n_z}^+)] |0\rangle = 0 . \end{aligned}$$

Dalje sledi:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{N} \sum_{k_x k_y} e^{ia(k_x m_x + k_y m_y)} [A_{N_z} (E - \Delta) + W A_{N_z} (e^{iak_x} + \\ & + e^{-iak_x} + e^{iak_y} + e^{-iak_y}) + W A_{N_z-1}] |0\rangle = 0 , \end{aligned}$$

pa se konačno dobija:

$$A_{N_z} [E - \Delta + 2W (\cos ak_x + \cos ak_y)] + W A_{N_z-1} = 0 . \quad (4.27)$$

Sada možemo formirati sistem od jednačina (4.23 - 4.27). Svaku od ovih jednačina delimo sa  $W$ , pri čemu uvodimo oznaku:

$$\varrho = \frac{E - \Delta + 2W (\cos ak_x + \cos ak_y)}{W} . \quad (4.28)$$

Pomenuti sistem jednačina ima oblik:

$$\begin{aligned} & \varrho A_0 + A_1 = 0 \\ & A_0 + \varrho A_1 + A_2 = 0 \\ & A_1 + \varrho A_2 + A_3 = 0 \\ & \cdot \quad \cdot \quad \cdot \\ & A_{l_z-1} + \varrho A_{l_z} + A_{l_z+1} = 0 \\ & \cdot \quad \cdot \quad \cdot \\ & A_{N_z-3} + \varrho A_{N_z-2} + A_{N_z-1} = 0 \\ & A_{N_z-2} + \varrho A_{N_z-1} + A_{N_z} = 0 \\ & A_{N_z-1} + \varrho A_{N_z} = 0 \end{aligned} \quad (4.29)$$

Sistem sadrži  $N_z + 1$  nepoznatih funkcija-koeficijenata razvoja:  $A_0$ ,  $A_1$ ,  $A_2$ , ...,  $A_{N_z}$ .

### 4.3. Energetski spektar elektrona idealne film-strukture

Pošto je ovaj sistem jednačina homogen determinanta tog sistema mora biti jednaka nuli:

$$D_{N_z+1} \equiv 0 \quad (4.30)$$

$$D_{N_z+1}(\varrho) = \begin{vmatrix} \varrho & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & \varrho & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \varrho & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & \varrho & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & \varrho & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & \varrho \end{vmatrix}_{N_z+1} \quad (4.31)$$

$D_{N_z+1}(\varrho)$  predstavlja determinantu sistema i može se izraziti pomoću karakterističnih Čebiševljevih polinoma (o njima će biti više reči u Dodatku), višestrukim razvijanjem po prvim i zadnjim vrstama i kolonama:

$$D_{N_z+1}(\varrho) = \varrho^2 D_{N_z-1}(\varrho) - 2\varrho^2 D_{N_z-2}(\varrho) + D_{N_z-3}(\varrho). \quad (4.32)$$

Uslov (4.30) se svodi na:

$$D_{N_z+1}(\varrho) = C_{N_z+1}(\zeta) = \frac{\sin(N_z+2)\zeta}{\sin \zeta}; \quad \varrho = 2 \cos \zeta$$

Iz uslova  $C_{N_z+1} \equiv 0$ , dobija se:

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

Na osnovu ovoga i jednačine (4.28) nalazimo:

$$\hbar \omega_\mu = \Delta - 2W (\cos ak_x + \cos ak_y - \cos \zeta_\mu) \quad (4.33)$$

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

$$k_z(\nu) = \frac{\pi}{a} \frac{\nu}{N_z + 2}; \quad \nu = 1, 2, 3, \dots, N_z + 1 \quad (4.34)$$

Zamenom ovih relacija u (4.33) i uzimajući u obzir da je  $E_{\vec{k}}(\nu) = \hbar \omega_\nu$  i  $\Delta = 6W$ , sledi:

$$E_{\vec{k}}(\nu) = 4 W \left[ \sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y}{2} + \sin^2 \frac{ak_z(\nu)}{2} \right] \quad (4.35)$$

Izraz (4.35) predstavlja zakon disperzije slabo vezanih elektrona u filmu i ima istu formu kao izraz (2.30) dobijen za idealne neograničene strukture, s razlikom što je tamo  $k_z$  praktično kontinualno promenljivo (u intervalu  $[0, \pi/a]$ )<sup>6</sup> kao što su  $k_x$  i  $k_y$ , a ovde je diskretno - dato izrazom (4.34).

<sup>6</sup>Posmatramo samo „desnu” polovinu spektra ( $k_j \geq 0$ ,  $j = x, y, z$ ) znajući da je on ogledalski simetričan.

Radi grafičke interpretacije izraza (4.35) napisaćemo ga u sledećem obliku:

$$\mathcal{E}_{\vec{k}}(\nu) \equiv \mathcal{F}_{k_x k_y} + \mathcal{G}_{k_z}(\nu), \quad (4.36)$$

gde su

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

Na slici 4.2 prikazan je zakon disperzije elektrona u filmu, gde je izmedju isprekidanih linija predstavljena zona kontinualnih dozvoljenih energija u idealnim (neograničenim) strukturama, dok su punim linijama označene diskretne vrednosti elektronskih energija u filmu.

Pored toga, uočava se da je:

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

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

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

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

U skladu sa gore pomenutim, dolazimo do zaključka da elektronski spektar u tankom filmu poseduje dva energetska gepa (slika 4.2), donji  $g$  i gornji  $h$ :

$$g = \mathcal{E}_f^{min} - \mathcal{E}_b^{min} = \left( \frac{\pi}{N_z + 2} \right)^2 \equiv \mathcal{E}_b^{max} - \mathcal{E}_f^{max} = h \quad (4.37)$$

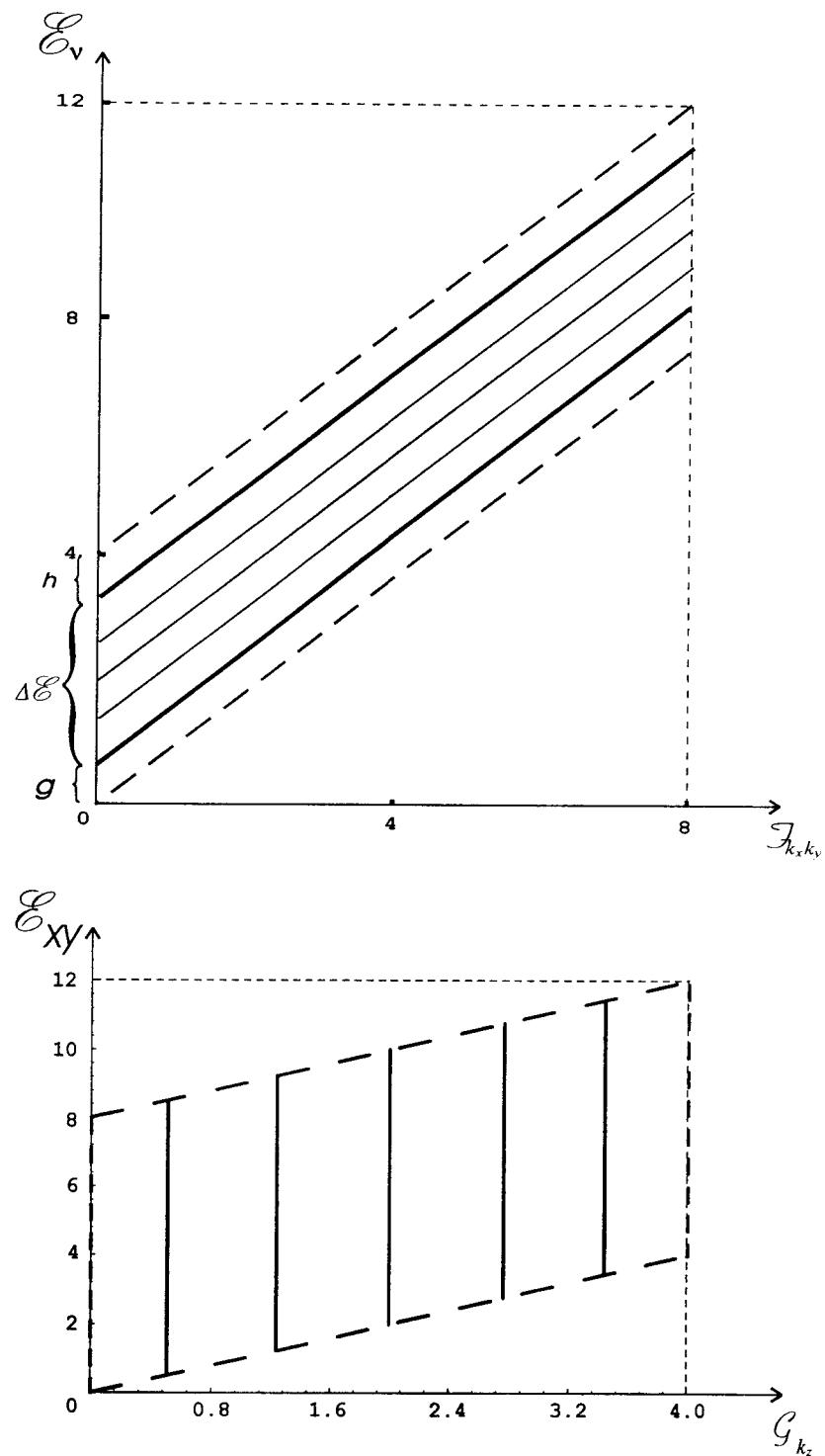
(indeks  $f$  označava film, a  $b$  beskonačnu strukturu).

Vidi se, a i na slici 4.3 (levo) je to grafički predstavljeno, da veličine gepova naglo opadaju sa debjinom filma (kvadratna zavisnost). To znači da je njihova praktična egzistencija vezana samo za ultratanke (nano) strukture.

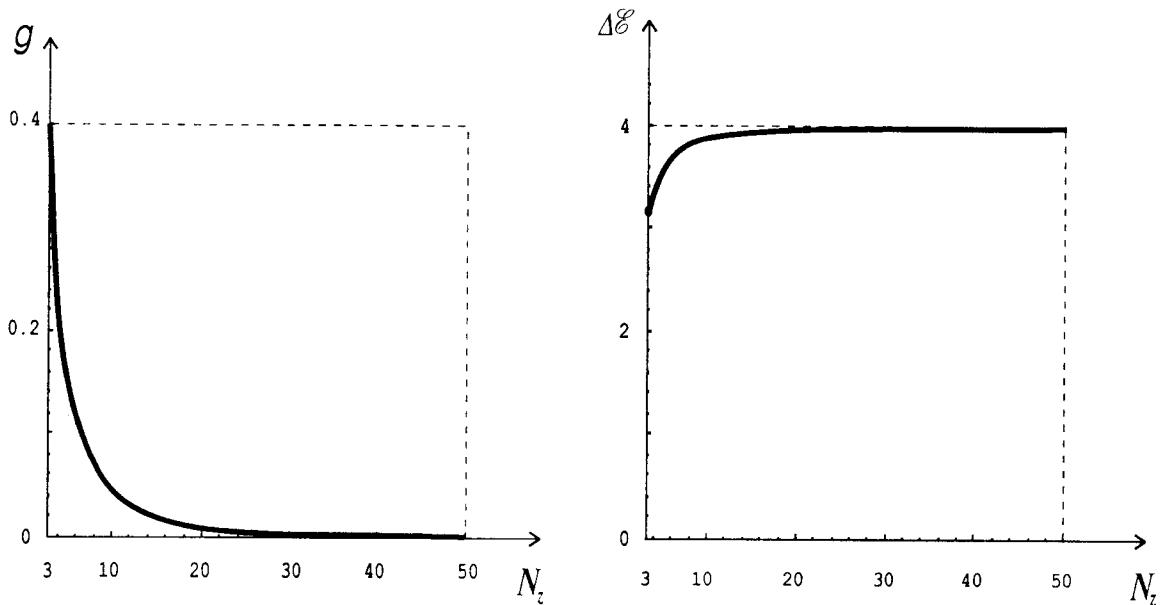
Osnovna posledica postojanja energetskih gepova je „suženje“ zone dozvoljenih energija elektrona (slika 4.3 desno):

$$\Delta\mathcal{E} \equiv (\Delta\mathcal{E})_f = (\Delta\mathcal{E})_b - (g + h) = 4 - 2 \left[ \frac{\pi}{N_z + 2} \right]^2. \quad (4.38)$$

Dakle, energetska zona elektrona u film-strukturama je, u odnosu na istu kod idealnih kristala, sužena za veličinu zbira energetskih gepova.



Slika 4.2: Zakon disperzije elektrona (elektronskog gasa) u filmu



Slika 4.3: Zavisnost energetskog gepa i širine energetske zone od debljine filma

Sa ove slike se vidi da se širina energetske zone elektrona kristalnog filma veoma brzo (parabolički) približava balkovskoj vrednosti, kada se debljina filma povećava, tj. kada raste broj slojeva  $N_z$ . Za izuzetno tanke filmove  $(\Delta E)_f$  je veoma uska, dok za  $N_z \rightarrow \infty$  ona teži  $(\Delta E)_b$ .

Uzimajući u obzir jednačinu (4.37) možemo odrediti aktivacionu temperaturu<sup>7</sup> elektrona u filmu:

$$T_{ac} = g \frac{W}{k_B} = \frac{W}{k_B} \left( \frac{\pi}{N_z + 2} \right)^2 \quad (4.39)$$

Iz ovog izraza vidi se da se ona ponaša na isti način kao energetski gepovi - veoma brzo (parabolički) opada sa porastom broja slojeva  $N_z$ . Za izuzetno tanke filmove  $T_{ac}$  je relativno visoka, dok za  $N_z \rightarrow \infty$  ona teži nuli<sup>8</sup>.

Na osnovu izraza za tenzor efektivne mase elektrona (2.20), odnosno (2.33) i izraza (4.35) sledi da se za efektivnu masu nanelektrisanja u film-strukturama dobija ista zavisnost kao i za beskonačne strukture (2.33). Ta činjenica dovodi do zaključka da je efektivna masa elektrona/šupljina ista u oba posmatrana sistema i da karakter elementarnih nosilaca nanelektrisanja, prisustvom granica, nije izmenjen.

<sup>7</sup>Ova temperatura je pridružena energiji aktivacije - donjem (pravom) energetskom gepu. U masivnim - neograničenim strukturama ova veličina ne egzistira jer je  $g_b = 0$ .

<sup>8</sup>Sada možemo izvršiti procenu veličine aktivacione temperature za zadatu vrednost fenomenološkog parametra  $W \sim 1$  eV i desetak kristalnih ravnih u z pravcu:  $T_{ac} \sim 20$  K.

## 5. Zaključak

U radu su istraženi i analizirani energetski spektri (moguća energetska stanja) elemen-tarnih nosilaca nanelektrisanja u kristalnim, idealnim beskonačnim i film strukturama, sa primitivnom kubnom rešetkom, na osnovu čega se došlo do sledećih važnijih rezultata.

1. Ove analize su pokazale bitne razlike u zakonu disperzije nanelektrisanja u pomenuta dva sistema, kao isključive posledice postojanja granica film-struktura, u kojima energetski spektri poseduju dva gepa. Veličine gepova zavise od debljine filma i veoma brzo opadaju sa njenim povećanjem.
2. Postojanje graničnih uslova ima za posledicu promenu širine energetske zone elek-trona. U odnosu na zonu dozvoljenih energija idealnih struktura sa praktično kontinualnim rasporedom, zona elektronskih dozvoljenih energija u filmu je izrazito diskretna. Povećanjem broja slojeva filma povećava se broj diskretnih stanja unutar zone dozvoljenih energija, kao i sama širina ove zone.
3. Spektar elektrona u film-strukturama poseduje jedan donji i jedan gornji energetski gep. Posledica postojanja donjeg energetskog gepa može da se tumači na sledeći način: on odgovara energiji osnovnog stanja elektronskog sistema i predstavlja naj-manju energiju koju treba uložiti da bi u filmu egzistirao elektronski gas. Sve do te energije (aktivacione temperature) elektroni se mogu nalaziti samo u nekim od vezanih stanja. S druge strane, pojavu gornjeg energetskog gepa možemo tumačiti i tako da se u film-strukturama, za veličinu minimalnog energetskog gepa, „spušta“ Fermijev nivo. Samo elektroni sa energijama većim od ove minimalne, mogu da učestvuju u transportnim i ostalim fizički interesantnim procesima, pa se lako može zaključiti da se to lakše ostvaruje u filmovima.
4. Efektivna masa elektrona u filmu i beskonačnim strukturama ostaje nepromenjena, što znači da se karakter i stanja nosioca nanelektrisanja ne menjaju.

Sve razlike izmedju posmatranih sistema su izraženije, što je film tanji, a izčezavaju kada debljina filma teži beskonačnosti.

## 6. Dodatak: Čebiševljevi polinomi

Karakteristične determinante oblika:

$$C_n(x) = \begin{vmatrix} x & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & x & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & x & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & x & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & x & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & x \end{vmatrix}_n \quad (6.1)$$

odgovaraju različitim vrednostima,  $n = 2, 3, 4, \dots, N$  uz prepostavljene početne uslove:

$$C_0(x) = 1 ; \quad C_1(x) = x . \quad (6.2)$$

Dalje možemo računati:

$$C_2(x) = \begin{vmatrix} x & 1 \\ 1 & x \end{vmatrix} = xC_1(x) - C_0(x) ; \quad C_3(x) = \begin{vmatrix} x & 1 & 0 \\ 1 & x & 1 \\ 0 & 1 & x \end{vmatrix} = xC_2(x) - C_1(x) .$$

Očigledno je da ove determinante zadovoljavaju sledeću rekurentnu relaciju<sup>9</sup>:

$$C_{n+1}(x) - xC_n(x) + C_{n-1}(x) = 0 \quad (6.3)$$

i nazivaju se Čebiševljevim polinomima druge vrste.

Rešenje ove jednačine tražimo u obliku:

$$C_n(x) \rightarrow C_n(\xi) = A \sin(n\xi) + B \sin(n-1)\xi , \quad (6.4)$$

pa sledi:

$$\begin{aligned} C_{n+1}(\xi) - C_{n-1}(\xi) &= A [\sin(n+1)\xi + \sin(n-1)\xi] + B [\sin(n\xi) + \sin(n-2)\xi] = \\ &= 2[A \sin(n\xi) + B \sin(n-1)\xi] \cos \xi = C_n \cdot 2 \cos \xi . \end{aligned}$$

Zamenom (6.2) i (6.4) u (6.3) nalazimo da je

$$x = 2 \cos \xi . \quad (6.5)$$

Koristeći početne uslove (6.2) za  $A$  i  $B$  dobijamo:

$$A = \frac{x}{\sin \xi} = \frac{2 \cos \xi}{\sin \xi} ; \quad B = -\frac{1}{\sin \xi} .$$

---

<sup>9</sup>Ona predstavlja homogenu diferencnu jednačinu drugog reda sa konstantnim koeficijentima.

Tada je:

$$\begin{aligned} C_n(\xi) &= \frac{2 \sin(n\xi) \cos \xi - \sin(n-1)\xi}{\sin \xi} = \\ &= \frac{2 \sin(n\xi) \cos \xi - \sin(n\xi) \cos \xi + \cos(n\xi) \sin \xi}{\sin \xi} = \\ &= \frac{\sin(n\xi) \cos \xi + \cos(n\xi) \sin \xi}{\sin \xi}. \end{aligned}$$

Kako je:

$$\sin(n+1)\xi = \sin(n\xi) \cos \xi + \cos(n\xi) \sin \xi,$$

sledi:

$$C_n(\xi) = \frac{\sin[(n+1)\xi]}{\sin(\xi)} ; \quad \xi \neq 0. \quad (6.6)$$

Nule Čebiševljevih polinoma, koje slede iz uslova:

$$C_n(\xi) \equiv 0 \quad (6.7)$$

date su sledećom relacijom:

$$\xi_\nu = \frac{\pi}{n+1} \nu ; \quad \nu = 1, 2, 3, \dots, n. \quad (6.8)$$

## 7. Literatura

1. B.S.Tošić: STATISTIČKA FIZIKA,  
*PMF IF*, Novi Sad 1978.
2. I.Supek: TEORIJSKA FIZIKA I STRUKTURA MATERIJE,  
*Školska knjiga*, Zagreb 1977.
3. A.S.Davydov: TEORIJA TVERDOGO TELA,  
*Nauka*, Moskva 1976.
4. Ch.Kittel: UVOD U FIZIKU ČVRSTOG STANJA,  
*Sav.Admin.* Beograd 1970.
5. M.I.Kaganov: ELEKTRONY, FONONY, MAGNONY,  
*Nauka*, Moskva 1979.
6. Lj.Ristovski: TEORIJA KONDENZOVANOG STANJA,  
*Fizički fakultet*, Beograd 1994.
7. D.Raković: FIZIČKE OSNOVE I KARAKTERISTIKE  
ELEKTROTEHNIČKIH MATERIJALA,  
*Elektrotehnički fakultet*, Beograd 1995.
8. Ž.A.Spassojević i Z.V.Popović: ELEKTROTEHNIČKI I ELEKTRONSKI  
MATERIJALI, *Promezzia*, Beograd 1995.
9. S.M.Stojković i S.K.Jaćimovski  
SUPERPROVODNOST - FENOMEN, EFEKTI I MATERIJALI  
*Fullerenes and Nanotubes Review* **1**/4, 5-18 (1997).
10. D.Lj.Mirjanić, S.M.Stojković, J.P.Šetrajčić and S.K.Jaćimovski  
ELECTRON SPECTRA IN CRYSTAL FILMS  
*Proceedings 20th MIEL*, 177-179 (1995).
11. S.K.Jaćimovski, S.M.Stojković, A.Slavković,  
J.P.Šetrajčić, D.Lj.Mirjanić and S.Lazarev  
ELECTRON STATES IN CRYSTAL FILM-STRUCTURES  
*Zbornik Matice sprske* (pr.nauke) **90**, 95 (1996).
12. J.P.Šetrajčić, D.Lj.Mirjanić, Z.V.Bundalo, Z.Rajilić, S.Lazarev,  
M.Pantić, V.M.Zorić, N.V.Delić, A.S.Utješanović,  
S.M.Stojković, S.K.Jaćimovski, I.D.Vragović i A.Slavković  
SPEKTRI I STANJA FONONA I ELEKTRONA  
U JEDNOSLOJNIM KRISTALNIM STRUKTURAMA <sup>10</sup>  
*SFIN*, 102-112 (1996).

<sup>10</sup> Pregledni rad po pozivu

UNIVERZITET U NOVOM SADU  
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET  
KLJUČNA DOKUMENTACIJSKA INFORMACIJA

- Redni broj:  
RBR
- Identifikacioni broj:  
IBR
- Tip dokumentacije: *Monografska dokumentacija*  
TD
- Tip zapisa: *Tekstualni štampani materijal*  
TZ
- Vrsta rada: *Diplomski rad*  
VR
- Autor: *Danijela Radlović, br.dos. 124/92*  
AU
- Mentor: *Dr Jovan Šetrajić, redovni profesor, PMF, Novi Sad*  
MN
- Naslov rada: *Jednoelektronska stanja u tankoslojnim kristalima*  
NR
- Jezik publikacije: *Srpski (latinica)*  
JP
- Jezik izvoda: *Srpski*  
JI
- Zemlja publikovanja: *Jugoslavija*  
ZP
- Uže geografsko područje: *Vojvodina*  
UGP
- Godina: *1998.*  
GO
- Izdavač: *Autorski reprint*  
IZ
- Mesto i adresa: *Prirodno-matematički fakultet, Trg Dositeja Obradovića 4, 21000 Novi Sad*  
MA
- Fizički opis rada: *(7/30/12/0/7/8/1)*  
FO
- Naučna oblast: *Fizika*  
NO
- Naučna disciplina: *Fizika čvrstog stanja*  
ND
- Predmetna odrednica / ključne reči:  
*kristalni filmovi, elektroni, jednočestične talasne funkcije, spektri, gepovi*  
PO
- Čuva se: *Biblioteka Instituta za fiziku, PMF, Novi Sad*
- Izvod: *U radu je primenjen metod jednočestičnih talasnih funkcija za ispitivanje uticaja granica film-struktura na energetski spektar i moguća stanja elektrona (elektronski zakon disperzije). Dobijeni rezultati predstavljeni su grafički i izvršene su analize, odnosno poređenja tih rezultata sa odgovarajućim u idealnim beskonačnim strukturama. Na osnovu toga uočene su najbitnije razlike izmedju posmatrana dva sistema.*  
IZ
- Datum prihvatanja teme od strane Veća:  
*27.03.1998.*  
DP
- Datum odbrane:  
*29.04.1998.*  
DO
- Članovi komisije:  
Predsednik:  
*Dr Ljiljana Mašković,*  
*vanr. profesor, PMF, Novi Sad*  
Članovi:  
*Dr Jovan Šetrajić,*  
*redovni profesor, PMF, Novi Sad*  
*Dr Radomir Kobilarov,*  
*vanr. profesor, PMF, Novi Sad*  
KO