

D-311

Природно-математички факултет  
Радна заједница заједничких послова  
НОВИ САД

Примљено: 27. јуна 1994			
Орг. јед.	Бр.	Факултет	Звање
0603	9/115		

**UNIVERZITET U NOVOM SADU  
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET  
INSTITUT ZA FIZIKU**

**Dragan Lj. Jevtić**

**SPEKTRI I STANJA FONONA  
U FILM-STRUKTURAMA**

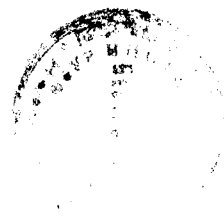
**-DIPLOMSKI RAD-**

**NOVI SAD, juna 1994.**

Koristim priliku da se zahvalim roditeljima, supruzi, svom mentoru  
dr J. P. Šetrajčiću, kao i mr. M. Pantiću na svesrdnoj pomoći.

## SADRŽAJ

<b>1. UVOD .....</b>	<b>4</b>
<b>2. OSCILOVANJE ATOMA KRISTALNE REŠETKE.....</b>	<b>6</b>
<b>2.1 Oscilovanje "jednoatomskog" linearnog lanca.....</b>	<b>7</b>
<b>2.2. Oscilovanje jednodimenzione dvoatomske rešetke.....</b>	<b>12</b>
<b>2.3. Oscilovanja atoma idealne trodimenzione rešetke.....</b>	<b>18</b>
<b>3. FONONI U REALNIM KRISTALNIM STRUKTURAMA .....</b>	<b>23</b>
<b>3.1. Normalne mode oscilovanja atoma u tankim strukturama .....</b>	<b>23</b>
<b>4. ZAKLJUČAK .....</b>	<b>29</b>
<b>5. LITERATURA.....</b>	<b>31</b>



## 1. UVOD

Oscilovanja atoma (molekula ili jona) kristala oko ravnotežnog položaja su uvek prisutna, bez obzira na vrstu elementarne eksitacije kao glavnih nosioca mehanizma koji proizvode određene fizičke osobine, pojave, efekte u kristalu. Ova oscilovanja atoma su prisutna čak pri približno apsolutnoj nuli.

Kristal se može predstaviti kao sistem u kome se nalaze atomi pravilno raspoređeni duž tri uzajamno normalna pravca koji su međusobno povezani elastičnim oprugama sa određenom konstantom elastičnosti. Sa porastom temperature ove veze bitno oslabe ili se kidaju. Tada isčezava kristalni oblik supstance, odnosno sa termodinamičke tačke gledišta kristal se topi i ta vrednost temperature, na kojoj se ovo dešava, je temperatura faznog prelaza iz čvrstog u tečno stanje supstance.

U ovom zadatku pretpostavlja se da je vrednost temperature sredine mala. To je slučaj kada su amplitude oscilovanja atoma oko ravnotežnog položaja male pa se takav oblik oscilovanja može smatrati harmonijskim.

Pošto je teorija oscilovanja atoma trodimenzionog kristala vrlo složena, radi bolje interpretacije početo je sa razmatranjem najjednostavnijeg sistema: to je jednoatomska linearna rešetka sastavljena od  $N$  istih atoma sa masom  $M$  i međusobnim rastojanjem  $a$  i povezani između sebe elastičnim oprugama konstante  $C$ . Ovi atomi su raspoređeni duž jednog pravca i mogu da se pomeraju samo duž tog pravca. Dalje je objašnjena dvoatomna linearna rešetka. Ona se zapravo sastoji iz atoma sa masom  $M_1$  i atoma sa masom  $M_2$ , koji su naizmenično poredani duž jednog pravca. Rastojanje

između atoma sa istom masom je  $2a$ . Ova dva prethodna razmatranja su iskorištena da bi se objasnilo oscilovanje atoma todimenzione rešetke.

Drugi deo ovog rada obuhvata klasično ispitivanje oscilovanja atoma rešetke oko ravnotežnog položaja u idealnim i film strukturama. Kod tankih filmova važno je naglasiti postojanje dveju graničnih ravni, kao i fizičke uslove koji vladaju na granicama tih ravni. Unutrašnjost filma je zadržala sve karakteristike idealne strukture.

Dobijeni rezultati pomoću metoda klasične fizike potpuno su u saglasnosti sa rešenjima kvantne i statističke fizike, jer fononi - elementarni kvanti oscilovanja atoma kristalne rešetke imaju klasičan (male oscilacije i normalne frekvencije) oscilatorni karakter spregnutih linearnih oscilatora.

U zaključku rada prebrojani su svi rezultati prethodnih analiza i dat je njihov kratak komentar.

## 2. OSCILOVANJE ATOMA KRISTALNE REŠETKE

U svakom čvrstom telu, na bilo kojoj temperaturi (uključujući i 0 K) atomi stalno osciluju oko svog srednjeg ravnotežnog položaja. Ako su amplitude oscilovanja male, onda se takve oscilacije mogu smatrati harmonijskim. Ovo je slučaj za čvrsta tela na temperaturama sve do sobnih. Sa povišenjem temperature ove oscilacijese povećavaju, kao i njihova energija i u blizini faznog prelaza one gube svoj harmonijski karakter, dolazi do kidanja međuatomskih veza itd. Predmet ispitivanja u ovom radu je ponašanje sistema atoma daleko od faznih prelaza, dakle u harmonijskoj oblasti oscilovanja.

Pošto su atomi međusobno jako povezani (jedan sa drugim), oscilovanje jednog atoma kristalne rešetke prenosi se na druge susedne atome, nastaje mehanički talas.

Sve moguće oscilacije jako međusobno spregnutih atoma mogu se predstaviti kao skup interagujućih elastičnih talasa različitih talasnih dužina (tj. frekvencija, ...) koji se prostiru u celoj zapremini kristala. Kako je telo ograničenih dimenzija na datoj temperaturi se uspostavlja stanje stacionarnih oscilovanja koje predstavlja superpoziciju ovih talasa , mogu da nastanu stojeći talasi i ovaj proces je sličan prostiranju zvučnih talasa u čvrstim telima.

Mnoge specifične fizičke pojave i osobine čvrstih tela (specifična toplota, toplotna provodnost, termičko širenje, električna provodnost,...) posledice su oscilovanja atoma kristalne rešetke i ne mogu se kvalitativno ni kvantitativno dobro objasniti, ako

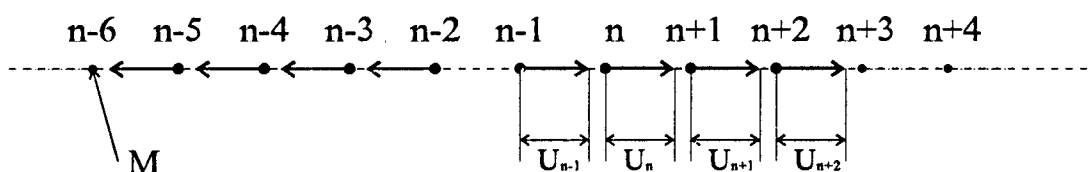
se ovi efekti ne uzmu u obzir. Zbog toga se smatra da su fononi osnovna pobudjenja u čvrstim telima.

## 2.1 Oscilovanje jednoatomskog linearnog lanca

Posmatramo rešetku od  $N$  jednakih atoma sa masom  $M$  i međusobnim rastojanjem  $a$  koji se pomeraju duž prave linije. Svaki atom u takvom sistemu ima jedan stepen slobode, a ceo sistem  $N$  stepeni slobode.

Ovakav model se dobro opisuje linijskom, primitivnom, Bravaisovom ćelijom u kojoj se položaj atoma određuje vektorom translacije  $\vec{T} = n\vec{a}$  gde je  $n$ -ceo broj koji definiše ravnotežni položaj  $n$ -tog atoma u lancu.

Neka je  $u_n(t)$  pomeraj  $n$ -tog atoma u nekom trenutku  $t$  u odnosu na njegov ravnotežni položaj sa koordinatom  $Y_n = na$ . Ako su pomeranja atoma iz ravnotežnog položaja mala u poređenju sa rastojanjem  $a$ , sile međuatomske interakcije mogu se smatrati kvazielastičnim i u skladu sa Hukovim zakonom one su proporcionalne pomerajima. Atomi rešetke su tada međusobno povezani elastičnim oprugama, a svaka od tih opruga se karakteriše konstantom elastičnosti  $C$ .



Slika 1. Linearna rešetka jednakih atoma

Pošto su svi atomi ravnopravni, dovoljno je naći jednačinu kretanja  $n$ -tog atoma. Pri tome uočljivo je da posmatrani atom interaguje samo sa svojim najbližim susedima. Rezultujuća sila koja pomera  $n$ -ti atom onda ima oblik:

$$F_n = \beta(u_{n+1} - u_n) - \beta(u_n - u_{n-1}) \dots \dots \dots (2.1)$$

gde je  $\beta$ - konstanta sile koja je povezana sa elastičnom konstantom  $C = \beta a$ . Na osnovu drugog Njutnovog zakona može se napisati:

$$M \frac{d^2 u_n}{dt^2} = \beta(u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n) \dots \dots \dots (2.2)$$

$$M \frac{d^2 u_n}{dt^2} = \beta(u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n) \dots\dots\dots (2.2)$$

Kako je  $u_n = u_n(t)$ , rešenje jednačine (2.2) može se potražiti u obliku:

$$u_n = u_0 \exp[i(kna - \omega t)] \dots\dots\dots (2.3)$$

Ovde  $u_0$  - određuje amplitudu pomeraja  $n$  - tog atoma,  $k = 2\pi / \lambda$  - je intezitet talasnog broja, a  $\omega$  - ugaona frekvencija oscilovanja posmatranog atoma.

Kao što se vidi iz jednačine (2.3), oblik normalnog harmonijskog modela oscilovanja atoma je u potpunosti određen pomeranjem jednog, bilo kog, atoma. Posle zamene rešenja (2.3) u jednačinu (2.2) dobija se:

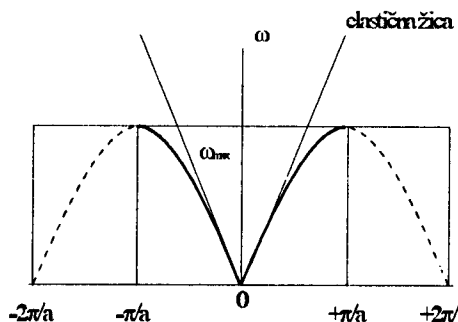
$$-M\omega^2 = \beta[\exp(ika) + \exp(-ika) - 2] \dots\dots\dots (2.4)$$

Odavde se vidi da svakoj vrednosti talasnog broja  $k$  odgovara određena vrednost  $\omega^2$ , pri čemu se  $\omega^2(k) = \omega^2(-k)$  tj. javlja se kao parna funkcija:

$$\omega = \pm \left( \frac{4\beta}{M} \right)^{1/2} \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \dots\dots\dots (2.5)$$

Budući da  $\omega$  ne može biti negativno, znak minus u jednačini (2.5) odgovara oblasti negativnih vrednosti  $k$ .

Zavisnost funkcije  $\omega = \omega(k)$  je data na slici (2) i vidi se, kao i iz jednačine (2.5), da frekvencija oscilovanj  $n$  - tog atoma ne zavisi od  $n$ , što govori da svi atomi u posmatranom modelu osciluju istom frekvencijom.



Slika 2.

Kako je  $|k| = 2\pi/\lambda$  i pri  $\lambda = 2a$  iz jednačine (2.5) sledi da je:

$$\omega = \omega_{max} = \left( \frac{4\beta}{M} \right)^{1/2} \dots\dots\dots (2.6)$$



S obzirom na približno linearnu zavisnost  $\omega$  od  $k$ , može se uzeti  $\omega_{max} \approx v_{zv} k$ , a  $v_{zv} = \sqrt{c/\rho}$  - brzina akustičnih talasa.

Pri malim vrednostima  $k$ , takođe i pri malim talasnim dužinama, a pri velikim rastojanjima atoma u rešetki,  $\omega$  zavisi od  $k$  linearno, kao i za neprekidnu elastičnu žicu sa gustinom  $\rho = M/a$ :

$$\omega = \left(\frac{4\beta}{M}\right)^{\frac{1}{2}} \sin \frac{ka}{2} \approx \left(\frac{4\beta}{M}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{ka}{2} = \left(\frac{c}{\rho}\right)^{\frac{1}{2}} = v_{zv} k \quad (2.7)$$

Razlika između diskretne rešetke i neprekidne žice je u odsustvu neproporcionalnosti između  $\omega$  i  $k$ . sl.2

Brzina rasprostiranja akustičkih talasa duž diskretne rešetke zavisi od talasne dužine  $\lambda$ :

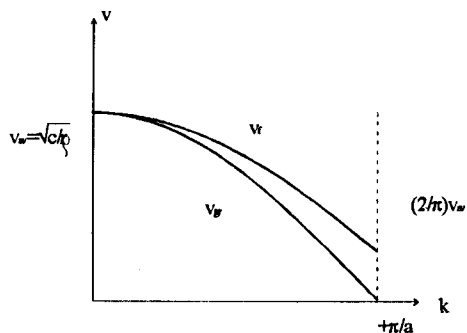
$$v = \frac{\omega \lambda}{2\pi} = \lambda \left(\frac{\beta}{M}\right)^{\frac{1}{2}} \sin \frac{\pi a}{\lambda} \quad (2.8)$$

Rešenje (2.3) opisuje talase koji se rasprostiru duž rešetke sa faznom brzinom:

$$v_f = \frac{\omega}{k} = v_{zv} \left| \frac{\sin\left(\frac{ka}{2}\right)}{\frac{ka}{2}} \right| \quad (2.9)$$

i grupnom brzinom

$$v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k} = v_{zv} \left| \cos\left(\frac{ka}{2}\right) \right|$$



Slika 3.

Sa slike (3) se vidi da pri malim vrednostima  $k$  važi jednakost:

$$v_f = v_{gr} = v_{zv} \quad (2.10)$$

Kao što se vidi iz (2.9) i sa sl.3 grupna brzina sa kojom se prenosi energija oscilovanja atoma u rešetki za najveće talasne dužine, tj. za  $k = \pi / a$  prelazi u nulu. To pokazuje da ovi modovi oscilovanja karakterišu stojeći talasi u obliku:

$$u_n = u_0 \exp i (k n a - \omega t) = u_0 \exp (i \omega t) \cos n \pi \dots\dots\dots (2.11)$$

koji se javljaju kao rezultat superponiranja dva talasa jednakih amplituda, frekvencija i talasnih dužina, ali koji se prostiru u suprotnim smerovima.

Za rešavanje jednačine (2.2) potrebno je definisati i granične uslove, to je potrebno radi određivanja intervala promena talasnih brojeva  $k$  i broj dozvoljenih vrednosti  $k$  u tom intervalu.

Da bi se izbegle nepogodnosti ograničenosti rešetke tj. da bi se izbeglo definisanje sila koje deluju na krajnje atome, uzima se slučaj kada atomi formiraju ogroman prsten. Tada se njegove osobine malo razlikuju od osobina linearne rešetke, važe Born - Karmanovi uslovi (uslov akustičnosti):

$$u_{n+N} = u_n \dots\dots\dots (2.12)$$

Unoseći rešenje (2.3) u jednačinu (2.12) dobija se:

$$u_{n+N} = \exp (i k N a) u_n \dots\dots\dots (2.13)$$

Poređenjem (2.12) i (2.3) sledi:

$$k N a = 2 \pi \nu \quad \left( \nu = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \pm \frac{N}{2} \right) \dots\dots\dots (2.14)$$

tj.  $k = (2\pi / a) (\nu / N)$  kvantuju se. Vrednosti  $k$  leže u intervalu intervalu

$$-\frac{\pi}{a} \leq k \leq \frac{\pi}{a} \dots\dots\dots (2.15)$$

što odgovara Brillucnoj zoni, koja se odnosi na talasni vektor elektrona. Broj linearno nezavisnih ne može da bude veći od  $N$ .

Opšte rešenje linearne jednačine kretanja za harmonijska oscilovanja  $n$  - tog atoma može se predstaviti u obliku superpozicije progresivnih talasa. Svaki od njih se karakteriše talasnim brojem  $k$ , frekvencijom  $\omega_k$  i amplitudom  $A_k$ . Tada se pomeraj  $u_n$  može predstaviti u obliku:

$$u_n = \sum_k A_k \exp [i (k n a - \omega_k t)] \dots\dots\dots (2.16)$$

Odgovarajućim izborom koordinata kretanje bilo kog sistema čestica koji čine male oscilacije, može da bude svedeno na kretanje samostalnih oscilatora. Radi toga se uvode takozvane normalne koordinate  $q_k$ , koje se javljaju kao zavisno promenljive od vremena, u skladu sa harmonijskim zakonom:

$$q_k = A_k \cdot \sqrt{N} \exp(i\omega_k t) \dots\dots\dots (2.17)$$

Nakon uvođenja (2.17) i (2.16) dobićemo:

$$u_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k q_k \exp(i k n a) \dots\dots\dots (2.18)$$

Jasno je da diferenciranjem (2.17) po  $t$  dobijamo:

$$\ddot{q}_k + \omega^2(k) q_k = 0 \quad (k = 1, 2, 3, \dots, N) \dots\dots\dots (2.19)$$

Jasno je da se radi o klasičnoj diferencijalnoj jednačini kretanja linearnog harmonijskog oscilatora. Ukupnu energiju tog oscilatora  $E_k$  čini njegova kinetička i potencijalna energija i određuje se klasičnim izrazom:

$$E_k = \frac{M}{2} \dot{q}_k^2 + \frac{M}{2} \omega_k^2 q_k^2 \dots\dots\dots (2.20)$$

gde je  $M$  masa oscilatora. Ukupna energija oscilovanja atomskog lanca je:

$$E = T + U = U_0 + \sum E_k \dots\dots\dots (2.21)$$

gde je  $T$  - kinetička energija, a  $U_0$  - potencijalna energija u stanju ravnoteže.

Ovde se može napraviti kvantno mehanička generalizacija za harmonijsko oscilovanje. U klasičnoj mehanici za jednodimenzioni harmonijski oscilator Hamiltonova funkcija ima oblik:

$$H = \frac{p_x^2}{2M} + \frac{M\omega_k^2 x^2}{2} \dots\dots\dots (2.22)$$

$p_x$  - impuls čestice

$x$  - rastojanje od ravnoteže

$M$  - masa čestice

$\omega_k$  - kružna sopstvena frekvencija oscilatora

U kvantnoj mehanici se kao jednodimenzioni oscilator podrazumeva sistem koga opisuje Hamiltonov operator jednak (2.22):

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2M} + \frac{M\omega_k^2 \hat{x}}{2} \dots\dots\dots (2.23)$$

gde je:  $\hat{p}_x = \hbar \frac{d}{dx}$  operator impulsa, a  $\hat{x}$  operator koordinate.

Šredingerova jednačina za stacionarna stanja oscilatora zapisana je kao:

$$\hat{H}\Psi = -\frac{\hbar}{2M} \frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{M\omega_k^2 \hat{x}}{2} = E_k \Psi \quad \dots\dots\dots (2.24)$$

Kao rešenje ove Šredingerove jednačine pojavljuju se moguće vrednosti energije:

$$E_k = \hbar\omega_k \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad (n = 0, 1, 2 \dots) \quad \dots\dots\dots (2.25)$$

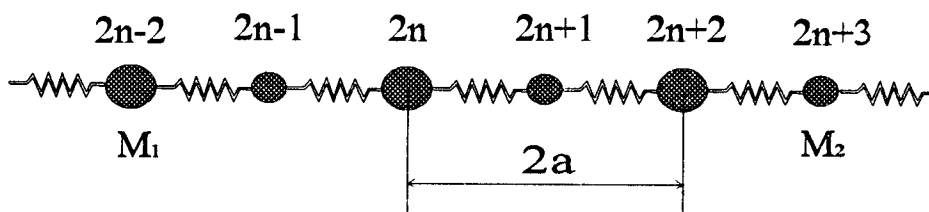
$n$  je glavni kvantni broj (ove vrednosti su diskretne), a ukupna energija atoma u rešetki:

$$E = U_0 + \sum_k E_k = U_0 + \sum_k \hbar\omega_k \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad \dots\dots\dots (2.26)$$

Član  $1/2$  u zagradama predstavlja "nultu" energiju čije je prisustvo uslovljeno okolnošću da čak i pri 0K atomi se ne mogu nalaziti u svojim ravnotežnim položajima saglasno sa Hajzenbergovom neodređenošću ( $\Delta p \Delta x \geq \hbar/2$ ).

## 2.2. Oscilovanje jednodimenzione dvoatomske rešetke

Ovaj model - dvoatomska linearna rešetka - je lanac duž kojega su naizmenično poredani atomi sa različitom masom  $M_1$  i  $M_2$ , a sile među parovima susednih atoma su jednake (sl.4).



Slika 4. Dvoatomska linearna rešetka atoma sa masom  $M_1$  i masom  $M_2$

Neka je  $u_{2n}$  pomeraj iz ravnotežnog položaja atoma sa masom  $M_1$  duž  $x$  pravca u momentu  $t$ , a  $u_{2n+1}$  pomeraj atoma sa masom  $M_2$  iz njegovog položaja ravnoteže.

Rezultujuće sile koje deluju na date atome imaju oblik:

$$\begin{aligned} F_{2n} &= \beta(u_{2n+1} - u_{2n}) - \beta(u_{2n} - u_{2n-1}) \\ F_{2n+1} &= \beta(u_{2n+2} - u_{2n+1}) - \beta(u_{2n+1} - u_{2n}) \end{aligned} \quad \dots \quad (2.27)$$

Prema drugom Njutnovom zakonu je:

$$\begin{aligned} M_1 \frac{d^2 u_{2n+1}}{dt^2} &= \beta(u_{2n+1} + u_{2n-1} - 2u_{2n}) \\ M_2 \frac{d^2 u_{2n+1}}{dt^2} &= \beta(u_{2n+2} + u_{2n} - 2u_{2n+1}) \end{aligned} \quad \dots \quad (2.28)$$

Rešenja u obliku progresivnih talasa su tipa:

$$\begin{aligned} u_{2n} &= u_1 \exp[i(2nka - \omega t)] \\ u_{2n+1} &= u_2 \exp i[(2n+1)ka - \omega t] \end{aligned} \quad \dots \quad (2.29)$$

Stavljajući rešenja u jednačine (2.28) i skraćujući množitelj  $\exp[i \cdot (2nak - \omega \cdot t)]$  dobijaju se jednačine:

$$\begin{aligned} (2\beta - M_1 \omega^2) u_1 - 2\beta \cos ka u_2 &= 0 \\ -2\beta \cos ka u_1 + (2\beta - M_2 \omega^2) u_2 &= 0 \end{aligned} \quad \dots \quad (2.30)$$

Ovaj sistem ima netrivialnih rešenja samo ako je determinanta sistema (2.30) jednaka nuli, odatle se dobija jednačina gde su  $\omega$  i  $k$  povezane na sledeći način:

$$\omega^4 - 2\beta \left( \frac{M_1 + M_2}{M_1 \cdot M_2} \right) \omega^2 + \frac{4\beta^2}{M_1 \cdot M_2} \sin^2 ka \quad \dots \quad (2.31)$$

čije rešenje za kvadrat frekvencije ima oblik:

$$\omega^2 = \beta \left( \frac{M_1 + M_2}{M_1 \cdot M_2} \right) \pm \beta \sqrt{\left( \frac{M_1 + M_2}{M_1 \cdot M_2} \right)^2 - \frac{4}{M_1 \cdot M_2} \sin^2 ka} \quad (2.32)$$

Negativno  $\omega$  nema fizičkog smisla, zato je interesantna samo pozitivna vrednost  $\omega$ . Iz (2.32) sledi da svakom talasnom broju odgovaraju dve vrednosti  $\omega$ , kao i dva tipa oscilacija (2.29). Koristeći se graničnim uslovima Karman-Borna (uslov cikličnosti:  $u_{2n+2N} = u_{2n}$  ili  $u_{2n+1+2N} = u_{2n+1}$ ) dobijaju se moguće vrednosti  $k$ :

$$u_{2n+2N} = u_1 \exp i[(2n+2N)ka - \omega t] = u_1 \exp i(2nka - \omega t) \exp(i2Nka)$$

koji su ispunjeni ako je  $\exp(i2Nka) = 1$ , što je moguće u slučaju:

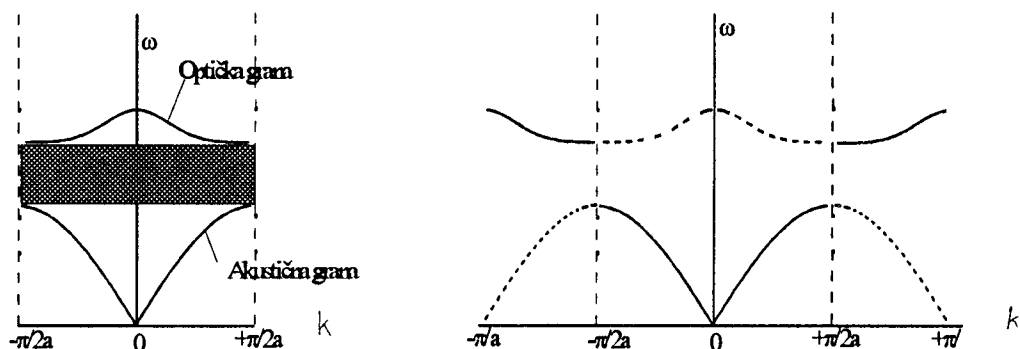
$$2Nka = 2\pi \nu \quad \Rightarrow \quad k = \frac{\pi \nu}{a N} \quad \dots \quad (2.33)$$

$$\nu = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \frac{N}{2}$$

Odavde se  $k$  ograničava intervalom mogućih diskretnih vrednosti:

$$-\frac{\pi}{2a} \leq k \leq \frac{\pi}{2a} \dots\dots\dots (2.34)$$

Iz poslednja dva izraza (2.34) i (2.33) može se videti da broj dozvoljenih neekvivalentnih vrednosti  $k$  u intervalu (2.34) i ograničeno granicom  $-\frac{N}{2} \leq v \leq +\frac{N}{2}$  je jednak broju elementarnih ćelija u rešetki  $N$ . Za svaku vrednost  $k$  postoje dva načina oscilovanja. Ukupni broj jednakih oscilovanja u intervalu (2.34) jednak je broju stepeni slobode tj.  $2N$ . Interval (2.34) svodi se na Brillouonovu zonu za dvoatomske rešetke.



Slika 5. Disperzione krive za dvoatomske linearne reške  
 a) sužena, b) proširena Brillouonova zona

Takvo rešenje problema oscilovanja dve vrste atoma u ovoj rešetki dovodi do dve krive zavisnosti  $\omega$  od  $k$ , tj. postoje dva zakona disperzije. Grane u Brillouonovoj zoni su prikazane na sl.5 za slučaj  $M_1 > M_2$ . Predstavljene zavisnosti  $\omega$  od  $k$  u proširenoj zoni jednake su njihovim predstavljanjima u suženoj, ukoliko dodatak u talasnom broju iz intervala (2.34) vrednosti  $2\pi/2a$  ne menja oblik rešenja. Niža kriva je akustična grana, a viša optička. Vidi se da je u celom intervalu promene talasnog vektora  $k$  frekvencija optičkih oscilacija veća od frekvencije akustičnih oscilacija. Za objašnjenje nastanka ovih grana razmatra se polazna frekvencija oscilovanja pri malim vrednostima  $k$  i pri  $k = \pm\pi/2a$ . Pri malim  $k$  ( $ka \ll 1$ ) u izrazu (2.31) razloži se  $\sin^2 ka$  u Maklorenov red i ograniči na prvi član razloženog reda ( $\sin^2 ka \approx k^2 a^2$ ). Koristeći se svojstvima kvadratne jednačine  $x^2 + px + q = 0$  ( $x_1 + x_2 = -p$ ,  $x_1 \cdot x_2 = q$ ) i činjenicom da se frekvencija oscilovanja optičke grane slabo menja u blizini  $k = 0$ , mogu se naći su koreni jednačine (2.31).

$$\text{optička grana } \omega_1 = \sqrt{2\beta \left( \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)} \dots\dots\dots (2.35)$$

$$\text{akustična grana } \omega_2 = k a \sqrt{\frac{2\beta}{M_1 + M_2}} \dots\dots\dots (2.36)$$

Poređenjem (2.36) i (2.6) može se izvesti zaključak da zavisnost  $\omega = \omega(k)$  opisuje granu longitudinalnih akustičnih oscilacija, koja, kao i u slučaju jednoatomske rešetke, teži nuli proporcionalno  $k$ . Vrednosti brzine zvuka za tu granu u slučaju dugih talasa daju izraz:

$$v_{zv} = a \sqrt{\frac{2\beta}{M_1 + M_2}} \dots\dots\dots (2.37)$$

Pri malom  $k$  fazna i grupna brzina su  $v_f = v_{gr} = v_{zv}$ . Ako je  $M_1 = M_2$  izraz (2.37) prelazi u izraz za brzinu zvuka  $v_{zv} = a\sqrt{B/M} = \sqrt{c/\rho}$  jednoatomske rešetke sa linearnom gustinom  $\rho = M/a$ .

Pri  $k = \pm \pi/2a$ , tj. na granici Brillouenove zone, frekvencija dostiže vrednost  $\omega_2 = \sqrt{2\beta/M_1}$ , kriva postaje nagnuta i grupna brzina prelazi u nulu tj. niža grana je analogna krivoj za jednoatomsku rešetku. Iz pokazanog je jasno zašto je niža grana dobila naziv akustična.

Druga grana nastaje pri  $k = 0$  od maksimalne vrednosti frekvencije:  $\omega_1 = \sqrt{2\beta(1/M_1 + 1/M_2)}$  koja sa rastom  $k$  opada naniže pri  $k = \pm \pi/2a$  vrednost joj je  $\sqrt{2\beta/M_2}$ . To je optička grana.

Kao što se vidi iz sl.5, dve grane odvojene zabranjenom trakom frekvencija (na slici izšrafiranoj) i u oblasti  $\sqrt{2\beta/M_1} < \omega < \sqrt{2\beta/M_2}$  jednačina (2.27) nema rešenja.

Isto tako, ako bi se u kristalnoj rešetki zameni npr. jedan ili višatoma mase  $M_2$  sa atomima  $M_1$ , tj. ako bi se "napravili" defekti u strukturi, u zabranjenoj oblasti bi se javila rešenja koje se nazvaju lokalizovanim rešenjima.

Ako se u jednačini stavi  $M_1 = M_2 = M$ , rešenje dobija oblik:

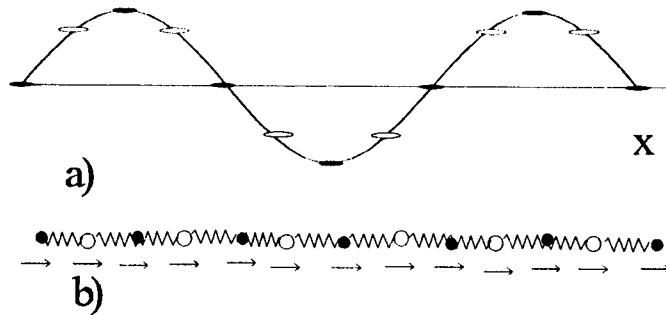
$$\omega_1 = \sqrt{\frac{4\beta}{M}} \cos k a = \sqrt{\frac{4\beta}{M}} \sin k a \quad \text{ili} \quad \omega^2 = \frac{2\beta}{M} (1 \pm \cos k a)$$

Rešenje sa sinusom se slaže sa rešenjem za jednoatomsku rešetku, a rešenje sa kosinusom se može zanemariti. Ako je širina zabranjene trake

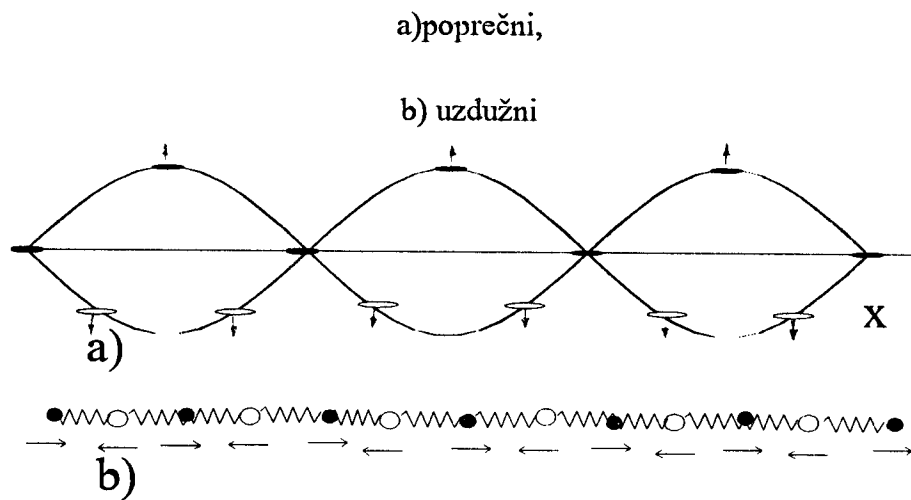


$\Delta = \left( \sqrt{2\beta/M_1} - \sqrt{2\beta/M_2} \right)$ , pri  $M_1 = M_2$ , prelazi u nulu. Na taj način pri  $M_1 = M_2$  zabranjena traka isčezava.

Razlike u fizičkom smislu između akustičnih i optičkih načina oscilovanja atoma u rešetki su objašnjena. Izjednačeni su odnosi amplituda oscilovanja  $u_1/u_2$  i faze oscilovanja susjednih atoma u jednoj i drugoj grani.



Slika 6. Oscilovanje akustičnih modela pri  $k=0$ :



Slika 7. Dugotalasni optički model oscilovanja kretanja atoma sa masom  $M_1$  i masom  $M_2$  pomeren sa fazom za  $180^\circ$

a) poprečni,

b) uzdužni



Pri malim vrednostima  $k$  (tj. pri  $k \ll 1$ ) u izrazu (2.29) i posle postavljanja rešenja (2.36) u jednačinu (2.30) pri  $k=0$  dobija se:

$$\begin{pmatrix} u_{2n} \\ u_{2n+1} \end{pmatrix}_{ak} = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = \dots\dots\dots (2.38)$$

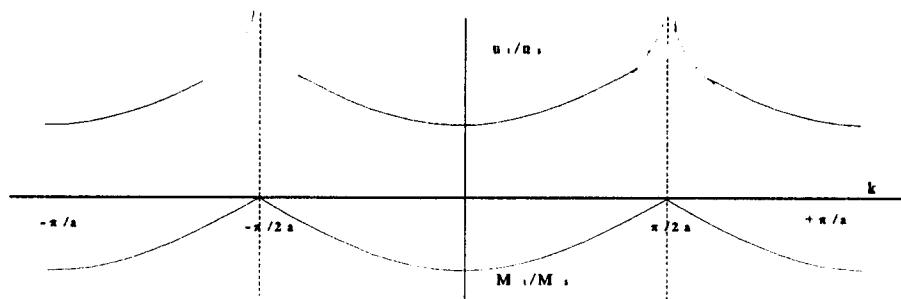
Otuda sledi da oscilovanje susednih atoma u rešetki potiče iz razlike u fazama i ima jednaku amplitudu.

Ako se u jednačini (2.30) postavi rešenje (2.35), za optičke grane pri  $k=0$  dobija se:

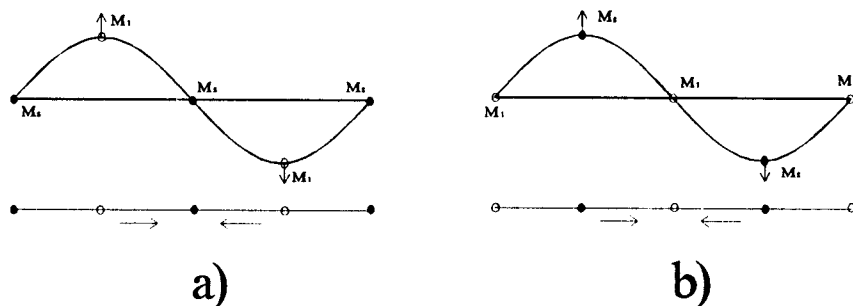
$$\frac{u_1}{u_2} = -\frac{M_2}{M_1} \dots\dots\dots (2.39)$$

tj. atomi ćelije osciluju u suprotnim smerovima, a centar mase svake ćelije (sadržeci atome dve vrste) ostaje na mestu (sl. 7) ukoliko amplitude pomeranja centra mase atoma u ćeliji zadovoljavaju relaciju:  $U_1 M_1 + U_2 M_2 = 0$ , što sledi i iz (2.39).

Da bi bio objašnjen karakter kretanja atoma u blizini granice Brillouenove zone (pri  $k = \pi/2a$ ) postavljena je zavisnost amplituda  $u_1/u_2$  od talasnog broja  $k$  za akustične i optičke grane (sl.8). Odatle se vidi da u blizini granice zone odnos amplituda za akustične grane teži beskonačnosti, što fizički predstavlja prigušenje amplitude oscilovanja lakih atoma. Pri tome, kao i pri malim vrednostima  $k$ , susedni atomi osciluju u fazi. Pri  $k = \pi/2a$  amplituda oscilovanja lakih atoma postaje jednaka nuli, a teži atomi mase  $M_1$  osciluju sa pomerenom fazom od  $180^\circ$  u odnosu na susedne teže atome (sl.9.a).



Slika 8. Zavisnost  $u_1/u_2$  od talasnog broja  $k$ : gornja kriva akustična, donja kriva optička



Slika 9. Kretanje atoma u dvoatomske rešetke u slučaju  $k = \pi/2a$ ;

a) akustična;

b) optička

Za optičku granu, odnos pri  $k$  približno  $\pi/2a$  teži nuli, susedni atomi osciluju u protivfazi (negativna vrednost  $u_1/u_2$ ) kao i pri malim vrednostima  $k$ . Pri  $k = \pi/2a$  odnos  $u_1/u_2 = 0$  i u tom slučaju atomi mase  $M_2$  kreću se sa amplitudom  $u_2$  i pomerenom fazom  $180^\circ$  u odnosu na susedne lake atome (sl.9.b).

Na taj način, u celom intervalu:  $0 \leq k \leq \pi/2a$ , u rešetki sastavljenoj od dve vrste atoma, sledi podela oscilovanja na optičku i akustičnu granu. Pri tome za akustični deo atomi oba tipa kreću se u sažetom talasu zajedno (u fazi). Za optički deo oscilovanje susednih atoma odvija se u protivfazi.

### 2.3. Oscilovanja atoma idealne trodimenzionalne rešetke

Posmatra se trodimenzionalna rešetka koja se sastoji iz jednakih atoma (masa  $M$ ) tako da na zapreminu kristala  $V$  dolazi  $N$  elementarnih primitivnih Bravaisovih ćelija. Ukoliko svaki atom ima tri stepena slobode to ceo kristal karakteriše  $3N$  stepeni slobode. Sada se ovde umesto pomeraja  $u$  mora uvesti vektor pomeraja  $\vec{u}_j$  u obliku progresivnih talasa:

$$\vec{u}_j = A_k \cdot \epsilon_v(\vec{k}) \cdot \exp[i(k \vec{R}_j - \omega t)] \dots\dots\dots (2.40)$$

gde je:

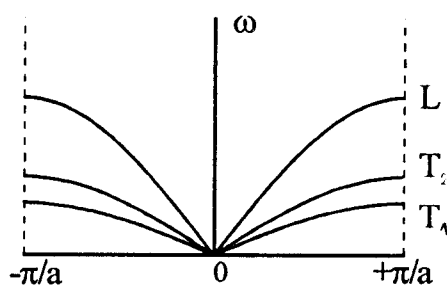
$\vec{k}$  - talasni vektor opredeljenog pravca prostiranja talasa;

$A_k$  - amplituda oscilovanja;

$\varepsilon_v(\vec{k})$  - jedinični vektor polarizacije normalnog modela, kojim se opisuje pravac u kom se kreću joni;

$\vec{R}_j$  - radijus vektor  $j$ -tog atoma u ravnotežnoj konfiguraciji.

Postavljeno rešenje (2.40) u sistemu  $3N$  jednačina kretanja daju sistem linearnih algebarskih jednačina za nepoznate amplitude  $A_k$ , koje ima netrivialna rešenja, ako je determinanta tog sistema jednaka nuli. Iz ovog uslova dobija se polinom trećeg stepena po  $\omega^2$  koje, u opštem slučaju, ima tri realna korena. Negativne vrednosti  $\omega$  ovde, naravno, nemaju smisla.



Slika 10. Disperzione krive za primitivnu 3d rešku

Na taj način za svaku vrednost talasnog vektora  $k$  postoji tri načina oscilovanja koji određuju tri grane (sl.9) disperzione relacije:

$$\omega = \omega_\nu(k) \quad (\nu = 1, 2, 3) \dots\dots\dots (2.41)$$

gde postoje  $L$  - longitudinalni talas i  $T_1$  i  $T_2$  transferzalni talasi.

Za nalaženje intervala promene i određivanje broja dozvoljenih vrednosti za  $k$  koriste se ponovo uslovi cikličnosti Karman - Borna. Za polaznu pretpostavku uzet je kristal u obliku paralelopipeda sa ivicama  $N_1\vec{a}_1$ ,  $N_2\vec{a}_2$ ,  $N_3\vec{a}_3$  gde su :  $\vec{a}_1 = a$ ,  $\vec{a}_2 = b$ ,  $\vec{a}_3 = c$  odgovarajuće konstante rešetke, a  $N_1$ ,  $N_2$  i  $N_3$  veliki celi brojevi (brojevi atoma).

Podudaranje sa uslovom cikličnosti za svaki poremećaj piše se u obliku:

$$\vec{u}_j(\vec{R}_j + N_i \vec{a}_i) = u_j(\vec{R}_j); \quad i = 1, 2, 3 \dots\dots\dots (2.42)$$

otuda i s obzirom na (2.40) sledi:

$$\vec{k}\vec{a}_i = 2\pi n_i/N_i ; n_i - \text{ceo broj} \dots\dots\dots (2.43)$$

ili

$$\vec{k} = 2\pi \left( \frac{n_1}{N_1} \vec{a}^* + \frac{n_2}{N_2} \vec{b}^* + \frac{n_3}{N_3} \vec{c}^* \right) \dots\dots\dots (2.44)$$

gde su  $\vec{a}^* \vec{b}^* \vec{c}^*$  vektori recipročne rešetke.

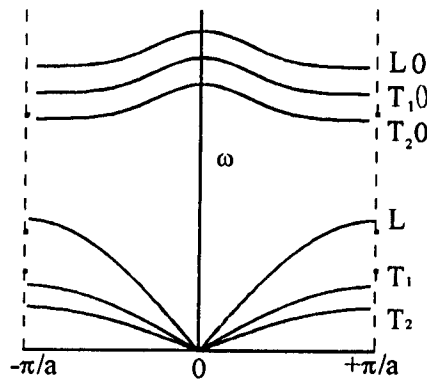
Moguće je pokazati da se promene talasnog vektora  $\vec{k}$  mogu ograničiti granicom prve Brillouenove zone (ćelija Vigner - Zajca), tj.

$$-\frac{\pi}{a} \leq k \leq \frac{\pi}{a} \dots\dots\dots (2.45)$$

Očigledno je da je broj dozvoljenih vrednosti za  $k$  u intervalu (2.45) jednak broju elementarnih ćelija  $N$  u kristalu.

U slučaju oscilovanja atoma trodimenzione rešetke sa bazisom, kada na elementarnu ćeliju upada  $r$  atoma (sistem sa  $3rN$  stepeni slobode) rešenja  $3rN$  jednačina dovodi do postojanja  $3r$  grana oscilovanja i disperzione relacije tih grana mogu se zapisati u sledećem obliku:

$$\omega_\nu^s(k) \quad (\nu = 1,2,3 ; s = 1,2,3,\dots,r \dots\dots\dots (2.46)$$



Slika 11.

Tri niže grane (sl.11) koje pri malim  $k$  teže linearno ka nuli nazivaju se akustičnim, a ostale ( $3r-3$ ) su optičke. One se takođe razlikuju i kao longitudinalne i transverzalne grane oscilovanja. Brzina rasprostiranja uzdužnih talasa veća je od brzine poprečnih talasa, dok je frekvencija uzdužnih talasa veća od frekvencije poprečnih ( $\omega_L > \omega_{T_2} > \omega_{T_1}$ ). Na taj način, u najopštijem slučaju, rešetka pokretnih atoma može da bude predstavljena kao superpozicija  $3rN$  normalnih oscilacija. Svako normalno

oscilovanje, sa mehaničke tačke gledišta, predstavlja harmonijski oscilator za koji normalne koordinate  $q_{ks}$  zadovoljavaju diferencijalnu jednačinu:

$$q_{\vec{k},s} + \omega^2(\vec{k}, s) q_{\vec{k},s} = 0 \dots\dots\dots (2.47)$$

Energija oscilovanja kristala jednaka je sumi energija oscilovanja  $3rN$  međusobno neintereagujućih harmonijskih oscilatora. Isto kao i u jednodimenzonom slučaju, lako je izvesti kvantno mehaničko uopštavanje. Svakom oscilatoru koji osciluje frekvencijom  $(\vec{k}, s)$  potrebno je saopštiti energiju:

$$E_{\vec{k},s} = \hbar \omega(\vec{k}, s) \left[ n(\vec{k}, s) + \frac{1}{2} \right]; \quad n(\vec{k}, s) = 0, 1, 2, \dots (2.48)$$

Ukupna energija je suma kinetičke i potencijalne energije i ima oblik:

$$E = \sum_{\vec{k}} \sum_s E_{\vec{k},s} = \sum_{\vec{k}} \sum_s \left[ n(\vec{k}, s) + \frac{1}{2} \right] \hbar \omega(\vec{k}, s) + U_0 \dots (2.49)$$

$U_0$  - potencijalna energija atoma u stanju ravnoteže

Svaki talas uporediv je sa oscilatorom koji osciluje sa frekvencijom  $(\vec{k}, s)$ .

Procesi koji nastaju u čvrstim telima povezani su sa oscilovanjima atoma kristalne rešetke koje izgleda prosto, osvrćući se na najfundamentalniju opštost kvantne mehanike u čijoj osnovi je ideja De Brojla o tome da svaki talas sa frekvencijom  $\omega$  i talasnim vektorom  $k$  može se uporediti sa česticom energije  $E = \hbar \omega$  i impulsa  $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ . Tako elektromagnetni talas može se smatrati kao kvantni oscilator zračenja i reći da se on sastoji od čestica - kvanata, zvanih fotoni. Svaki foton ima energiju  $\hbar \omega$ . Analogno sa osvrtom na formulu (2.48) za energiju kvantnog oscilatora, to znači da se mehanički talas sa talasnim vektorom  $\vec{k}$  i polarizacijom  $s$ , može razmatrati kao sveukupnost  $n(\vec{k}, s)$  kvanata sa energijama  $\hbar \omega(\vec{k}, s)$  i plus energija osnovnog stanja  $1/2 \hbar \omega(\vec{k}, s)$ . Ti kvanti zvučnih talasa nazivaju se fononima. Fonon nosi najmanju moguću energiju kao i kod elektromagnetnog pobuđivanja. "Složeno" pobuđivanje je pobuđivanje koje sadrži puno fonona. Iz pokazanog se vidi da svaki model oscilovanja sa klasičnom frekvencijom  $\omega(\vec{k}, s)$  moguće je izazvati sa celobrojnim kvantom energije  $\hbar \omega(\vec{k}, s)$  pri tome veličina  $n(\vec{k}, s)$  u formuli (49) ima prosti smisao - to je broj fonona date vrste sa impulsom  $\vec{p}$  i energijom  $\hbar \omega(\vec{k}, s)$ .

U čvrstom telu mogući su kako akustični tako i optički fononi. Ukoliko je frekvencija oscilovanja optičkih fonona veća od frekvencije akustičnih fonona i energija optičkih fonona je veća od energije akustičnih fonona.

Za razmatranje ponašanja čvrstih tela pogodno je uvođenje pojma gasa fonona. Čvrsto telo sastavljeno je od ćelija u kojima je fononski gas zatvoren. Fononi, kao i čestice običnog gasa, kreću se od zida do zida takve ćelije, sudarajući se jedan sa drugim; u rezultatima ovih interakcija, fononi mogu se stvarati i iščezavati. Fononski gas je zato neobični gas. Broj fonona u čvrstom telu nije konstantan: više ih je čim je viša temperatura i obrnuto. Fononi se mogu pobuđivati i mehaničkim putem.

### 3. FONONI U REALNIM KRISTALNIM STRUKTURAMA

Realne kristalne strukture, za razliku od idealnih, su nepravilne sa defektima, primesama i sl. Odsustvu translacione invarijantnosti takvog sistema sigurno, a možda i u najvišoj meri, doprinosi konačnosti dimenzija kristalnog uzorka. Postojanje graničnih površina kristala, koje bitno utiču na promenu fizičkih karakteristika istog, veoma komplikuje teorijska razmatranja. Razvoj savremene tehnologije izrade kristala, omogućio je stvaranje uzorka vrlo malih dimenzija. Među njima veoma su značajne tzv. film - strukture čije su dimenzije  $L_1$  i  $L_2$  mnogo veće od debljine  $L_3$ . Fizičke osobine tankih filmova uzduž njegove debljine jako se razlikuju od istih osobina uzduž druga dva pravca. Zato je interesantno istražiti upravo taj uticaj granica sistema na fononska stanja i spektre.

#### 3.1. Normalne mode oscilovanja atoma u tankim strukturama

Posmatrajmo tanki film "istrgnut" iz izotropne kubne idealne strukture sa konstantama rešetke  $a_x = a_y = a_z = a$ . Pretpostavimo da film ima konačnu debljinu u  $z$ -pravcu, dok su  $XY$ -ravni beskonačne.

Hamiltonijan fononskog podsistema opisanog filma u aproksimaciji najbližih suseda može biti napisan na sledeći način:

$$H = H_B + H_v \dots\dots\dots (3.1)$$

gde su:

$$\begin{aligned}
 H_B = & \frac{1}{4} \sum_{\alpha, n_x, n_y} C_{\alpha, \alpha} \left\{ \left( u_{\alpha: n_x, n_y, 0} - u_{\alpha, n_x+1, n_y, 0} \right)^2 + \left( u_{\alpha: n_x, n_y, 0} - u_{\alpha, n_x-1, n_y, 0} \right)^2 + \left( u_{\alpha: n_x, n_y, 0} - u_{\alpha, n_x, n_y+1, 0} \right)^2 + \right. \\
 & + \left( u_{\alpha: n_x, n_y, 0} - u_{\alpha, n_x-1, n_y, 0} \right)^2 + \left( u_{\alpha: n_x, n_y, 0} - u_{\alpha, n_x+1, n_y, 1} \right)^2 + \left( u_{\alpha: n_x, n_y, N_z} - u_{\alpha, n_x, n_y+1, N_z} \right)^2 + 2 u_{\alpha: n_x, n_y, 0}^2 + \\
 & \left. + \left( u_{\alpha: n_y, N_z} - u_{\alpha, n_x+1, n_y, N_z} \right)^2 + \left( u_{\alpha: n_x, n_y, N_z} - u_{\alpha, n_x, n_y, N_z-1} \right)^2 + 2 u_{\alpha: n_x, n_y, N_z}^2 \right\} \\
 H_V = & \frac{1}{2} \sum_{n_x, n_y, n_z} \frac{P_{\alpha: n_x, n_y, n_z}^2}{M} + \frac{1}{4} \sum_{\alpha, n_x, n_y} \sum_{n_z=1}^{N_z-1} C_{\alpha, \alpha} \left[ \left( u_{\alpha, n_x, n_y, n_z} - u_{\alpha, n_x+1, n_y, n_z} \right)^2 + \right. \\
 & + \left( u_{\alpha: n_x, n_y, n_z} - u_{\alpha, n_x, n_y-1, n_z} \right)^2 + \left( u_{\alpha: n_x, n_y, n_z} - u_{\alpha, n_x, n_y+1, n_z} \right)^2 + \left( u_{\alpha: n_x, n_y, n_z} - u_{\alpha, n_x, n_y-1, n_z} \right)^2 + \\
 & \left. + \left( u_{\alpha: n_x, n_y, n_z} - u_{\alpha, n_x, n_y, n_z+1} \right)^2 + \left( u_{\alpha: n_x, n_y, n_z} - u_{\alpha, n_x, n_y, n_z-1} \right)^2 \right] \\
 & \dots \dots \dots (3.2)
 \end{aligned}$$

U navedenim izrazima  $H$  predstavlja oscilatorni hamiltonijan filma u kojem je jedino narušenje simetrije odsustvo slojeva  $n_z = -1$  i  $n_z = N_z + 1$ . Hamiltonijan  $H$  razbijen je na dva dela, gde  $H_B$  obuhvata granične slojeve, a  $H_V$  unutrašnjost filma.

U ovim formulama  $u_\alpha$  su projekcije atomskog pomaka,  $p_\alpha = M \dot{u}_\alpha$  su odgovarajući impulsi.  $M$  su mase atoma i  $C$  su Hukove konstante. Indeks  $\alpha = x, y, z$  označava projekciju na odgovarajuće ose Dekartovog sistema, dok rešetkini indeksi  $n_x, n_y$  i  $n_z$  leže u intervalima

$$\begin{aligned}
 n_\beta \in & \left\{ \left[ -\frac{N_\beta}{2}, \frac{N_\beta}{2} \right]; \beta = x, y \right. \\
 n_z \in & [0, N_z] \quad N_x \approx N_y \approx 10^8 \quad N_z \ll N_x N_y
 \end{aligned} \dots \dots \dots (3.3)$$

Da bismo odredili konačne jednačine kretanja za pomeraje krenućemo od klasičnih Hamiltonovih jednačina:

$$\dot{P}_{\alpha i} = -\frac{\partial H}{\partial u_{\alpha: i}}, \quad \dot{u}_{\alpha i} = -\frac{\partial H}{\partial P_{\alpha: i}}, \quad \vec{n} \in (\vec{n}_x, \vec{n}_y, \vec{n}_z) \dots \dots \dots (3.4)$$

Nakon sredivanja dobijamo

$$\begin{aligned}
 \dot{P}_{\alpha: n_x, n_y, n_z} = & C_{\alpha, \alpha} \left( u_{\alpha, n_x+1, n_y, n_z} + u_{\alpha, n_x-1, n_y, n_z} - 2u_{\alpha: n_x, n_y, n_z} + u_{\alpha, n_x, n_y+1, n_z} + u_{\alpha, n_x, n_y-1, n_z} - \right. \\
 & \left. - 2u_{\alpha: n_x, n_y, n_z} + u_{\alpha, n_x, n_y, n_z+1} + u_{\alpha, n_x, n_y, n_z-1} - 2u_{\alpha: n_x, n_y, n_z} \right)
 \end{aligned} \quad (3.5)$$

$$\dot{u}_{\alpha: n_x, n_y, n_z} = \frac{P_{\alpha: n_x, n_y, n_z}}{M} \quad \Rightarrow \quad \dot{P}_{\alpha: n_x, n_y, n_z} = M \ddot{u}_{\alpha: n_x, n_y, n_z} \dots \dots \dots (3.6)$$

Ako u jednačinu (3.6) uvrstimo izraz (3.5) dobićemo:



$$\ddot{u}_{\alpha:n_x,n_y,n_z} - \Omega_{\alpha\alpha}^2 \left( u_{\alpha:n_x+1,n_y,n_z} + u_{\alpha:n_x-1,n_y,n_z} - 2u_{\alpha:n_x,n_y,n_z} + u_{\alpha:n_x,n_y+1,n_z} + \right. \\ \left. + u_{\alpha:n_x,n_y-1,n_z} - 2u_{\alpha:n_x,n_y,n_z} + u_{\alpha:n_x,n_y,n_z+1} + u_{\alpha:n_x,n_y,n_z-1} - 2u_{\alpha:n_x,n_y,n_z} \right) = 0 \quad (3.7)$$

gde je  $\Omega_{\alpha\alpha} = \sqrt{C_{\alpha\alpha}/M}$  i one važe za  $n_z \in (1, 2, \dots, N_z - 1)$

Za slučaj  $n_z = 0$  ova jednačina ima oblik:

$$\ddot{u}_{\alpha:n_x,n_y,0} - \Omega_{\alpha\alpha}^2 \left( u_{\alpha:n_x+1,n_y,0} + u_{\alpha:n_x-1,n_y,0} - 2u_{\alpha:n_x,n_y,0} + u_{\alpha:n_x,n_y+1,0} + \right. \\ \left. + u_{\alpha:n_x,n_y-1,0} - 2u_{\alpha:n_x,n_y,0} + u_{\alpha:n_x,n_y,1} - 2u_{\alpha:n_x,n_y,0} \right) = 0 \quad \dots (3.8)$$

a za  $n_z = N_z$

$$\ddot{u}_{\alpha:n_x,n_y,N_z} - \Omega_{\alpha\alpha}^2 \left( u_{\alpha:n_x+1,n_y,N_z} + u_{\alpha:n_x-1,n_y,N_z} - 2u_{\alpha:n_x,n_y,N_z} + u_{\alpha:n_x,n_y+1,N_z} + \right. \\ \left. + u_{\alpha:n_x,n_y-1,N_z} - 2u_{\alpha:n_x,n_y,N_z} + u_{\alpha:n_x,n_y,N_z} - 2u_{\alpha:n_x,n_y,N_z} \right) = 0 \quad (3.9)$$

Rešenja sistema diferencijalnih jednačina (3.7), (3.8) i (3.9) potražićemo u obliku:

$$u_{\alpha:n_x,n_y,n_z} = \sum_{k_x,k_y,k_z} A_{\alpha n_z}(k_z) e^{i\alpha(n_x k_x + n_y k_y) - i\omega t} \dots (3.10)$$

U navedenom izrazu  $A_{\alpha n_z}$  predstavlja amplitude oscilovanja. Nakon uvrštavanja jednačine (3.10) i njenih prvih i drugih izvoda u jednačine kretanja (3.7), (3.8) i (3.9) dobijamo sistem jednačina:

$$A_{\alpha n_z+1}(k_z) + A_{\alpha n_z-1}(k_z) + \rho_{\alpha;k_x,k_y,k_z} A_{\alpha n_z}(k_z) = 0 \quad 1 \leq n_z \leq N_z - 1 \quad (3.11)$$

$$A_{\alpha n_z+1}(k_z) + A_{\alpha n_z-1}(k_z) + \rho_{\alpha;k_x,k_y,k_z} A_{\alpha n_z}(k_z) = 0; \quad n_z = 0 \dots (3.12)$$

$$A_{\alpha N_z-1}(k_z) + \rho_{\alpha;k_x,k_y,k_z} A_{\alpha N_z}(k_z) = 0; \quad n_z = N_z \dots (3.13)$$

gde je

$$\rho_{\alpha;k_x,k_y,k_z} = \frac{\omega_{\alpha;k_x,k_y,k_z}^2}{\Omega_{\alpha\alpha}^2} - 4 \left( \sin^2 \frac{\alpha k_x}{2} + \sin^2 \frac{\alpha k_y}{2} \right) - 2 \dots (3.14)$$

Ako stavimo da je  $A_{\alpha n_z}(k_z) = A_n$ ;  $N_z = N$  i  $\rho = \rho_{\alpha;k_x,k_y,k_z}$

eksplicitni oblik jednačine je:

$$\rho A_0 + A_1 + 0 + 0 + 0 + \dots + 0 + 0 + 0 + 0 + 0 + 0 + 0 = 0 \dots (3.15.1)$$

$$A_0 + \rho A_1 + A_2 + 0 + 0 + \dots + 0 + 0 + 0 + 0 + 0 + 0 + 0 = 0 \dots (3.15.2)$$

$$0 + A_1 + \rho A_2 + A_3 + 0 + \dots + 0 + 0 + 0 + 0 + 0 + 0 + 0 = 0 \dots (3.15.3)$$

.....  
 .....  
 .....

$$0 + 0 + 0 + 0 + 0 + 0 + \dots + A_{N-3} + \rho A_{N-2} + A_{N-1} + 0 = 0 \quad \dots\dots\dots (3.15.N-1)$$

$$0 + 0 + 0 + 0 + 0 + 0 + \dots + 0 + A_{N-2} + \rho A_{N-1} + A_N = 0 \quad \dots\dots\dots (3.15.N)$$

$$0 + 0 + 0 + 0 + 0 + 0 + \dots + 0 + 0 + A_{N-1} + \rho A_N = 0 \quad \dots\dots\dots (3.15.N+1)$$

Da bi prethodni sistem jednačina imao netrivialna rešenja, determinanta sistema mora biti jednaka nuli (jer je to sistem homogenih algebarskih jednačina  $A_n$ ):

$$D_{N+1}(\rho) = \begin{vmatrix} \rho & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & \rho & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \rho & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & \rho & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & \rho & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & \rho \end{vmatrix} \quad \dots\dots\dots (3.16)$$

Determinanta (3.17) predstavlja jednu od reprezentacija Čebišljeovih polinoma druge vrste i za nju se može pisati

$$D_{N_z+1}(\rho) = \frac{\sin(N_z+2)\xi_{v_z}}{\sin \xi_{v_z}}, \quad \xi_{v_z} = 0, \rho = 2 \cos \xi_{v_z} \quad \dots\dots\dots (3.17)$$

Izjednačavajući determinantu (3.18) sa nulom dobijamo

$$\xi_{v_z} = \frac{\pi v_z}{N_z+2}, \quad v_z = 1, 2, 3, \dots, N_z + 1 \quad \dots\dots\dots (3.18)$$

$$\rho_{v_z} = 2 \cos \frac{\pi v_z}{N_z+2}, \quad \dots\dots\dots (3.19)$$

Zamenjujući (3.18) u (3.14) dobijamo izraz za normalne (fononske) frekvencije u nedeformisanom filmu:

$$\omega_{\alpha k_x k_y v_z} = 2\Omega_{\alpha\alpha} \sqrt{\sin^2\left(\frac{ak_x}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{ak_y}{2}\right) + \cos^2\left(\frac{\pi v_z}{2(N_z+2)}\right)} \quad (3.20)$$

Nakon smene indeksa  $\mu_z = N_z + 2 - v_z$ ;  $v_z = 1, 2, 3 \dots N_z + 1$  formula (3.20) može biti napisana u simetričnom obliku:

$$\omega_{\alpha k_x k_y v_z} = 2\Omega_{\alpha\alpha} \sqrt{\sin^2\left(\frac{ak_x}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{ak_y}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{ak_z}{2}\right)} \quad \dots (3.21)$$

pri čemu je :

$$k_z = \frac{\pi}{a} \frac{\mu_z}{N+2}; \quad \mu_z = 1, 2, 3, \dots, N_z + 1 \quad \dots\dots\dots (3.22)$$

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

Ako sistem jednačina (3.11), (3.12) i (3.13) podelimo sa nultom amplitudom  $A_0$  dobija se sistem jednačina u novom obliku:

$$B_1 + \rho = 0, \quad \text{za } n_z = 0 \dots\dots\dots (3.24)$$

$$B_2 + \rho B_1 + 1 = 0, \quad \text{za } n_z = 1 \dots\dots\dots (3.25)$$

$$B_{N_z+1} + B_{N_z-1} + \rho B_{N_z} = 0, \quad \text{za } 2 \leq n_z \leq N_z - 1 \dots\dots\dots (3.26)$$

gde je  $B_{N_z} \equiv B_{\alpha, n_z} = A_{\alpha, 0}^{-1} A_{\alpha, n_z}$  jednačina (3.26) je zadovoljena za :

$$B_{n_z} = (-1)^{n_z} \{ p \sin(\xi n_z) + q \sin[\xi(n_z - 1)] \} \dots\dots\dots (3.27)$$

i odavde jednačina (3.17) sledi:

$$B_1 = -p \sin \xi; \quad B_2 = p \sin(2\xi) + q \sin \xi$$

Zamenjujući ove izraze u (3.24) dobijamo koeficijente  $p$  i  $q$

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

Vraćajući izraze za  $p$  i  $q$  u (3.27) dobijamo :

$$B_{n_z} = (-1)^{n_z} \frac{\sin[\xi(n_z + 1)]}{\sin \xi} \dots\dots\dots (3.28)$$

iz čega sledi:

$$A_{\alpha, n_z, v_z} = (-1)^{n_z} \frac{\sin[\xi(n_z + 1)] \xi_{v_z}}{\sin \xi_{v_z}} A_{\alpha, 0} \dots\dots\dots (3.29)$$

Zamenjujući ovaj izraz za nadene amplitude atomskih pomeraja u (3.10) dobijamo konačan oblik izraza za atomske male pomeraje oko ravnotežnih položaja:

$$u_{\alpha, n_x, n_y, n_z} = \sum_{\alpha, k_x, k_y, v_z} (-1)^{n_z} \frac{\sin(n_z + 1) \xi_{v_z}}{\sin \xi_{v_z}} A_{\alpha, 0} e^{ia(n_x k_x + n_y k_y) - i\omega_{\alpha, k_x, k_y, v_z} t} \quad (3.30)$$

Posle normiranja (određuje se  $A_{\alpha, 0}$ ) on postaje

$$u_{\alpha, n_x, n_y, n_z}(t) = \sum_{\alpha, k_x, k_y, k_z} (-1)^{n_z} \sqrt{\frac{\hbar}{MN_x N_y (N_z + 2) \omega_{\alpha, k_x, k_y, k_z}}} e^{ia(n_x k_x + n_y k_y) - i\omega_{\alpha, k_x, k_y, k_z} t} \dots\dots\dots (3.31)$$

Na ovaj način određene su kanonske jednačine fononskih pomeraja (3.31) i njihove frekvencije (3.21), odnosno energije. Bitno je uočiti da one zavise od debljine

filma i da u graničnom slučaju; kad  $N_z \rightarrow (N_x, N_y) \rightarrow \infty$ , ovaj izraz prelazi u klasičan trodimenzioni fononski sličaj (2.3).

## 4. ZAKLJUČAK

Interpretirajući dobijene frekvencije oscilovanja atoma kristalne rešetke i njihove pomeraje u idealnim i film-strukturama pomoću klasične fizike dobijena su rešenja koja su identična sa rešenjima što daje kvantna i statička fizika. Ovo je zapravo potvrda toga da su fononi realni kvanti energije harmonijskog oscilovanja.

Upoređujući rezultate koji su dobijeni za tanke filmove sa odgovarajućim idealnim beskonačnim strukturama može se zaključiti sledeće:

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

b) Amplituda pomaka u filmovima je  $\approx 10^4 \sqrt{2/N_z}$  ( $N_z \approx 10^3 \div 10^4$ ) puta veća nego amplituda pomaka u idealnim beskonačnim strukturama što sledi iz zadnje jednačine.

c) Tri akustične frekvencije u masenim strukturama teže nuli kada  $K$  teži nuli. S druge strane minimalne frekvencije u tankom filmu su date kao

$$\min \left\{ \omega_{\alpha; k_x, k_y, k_z} \right\} = \omega_{\alpha} \left( k_x = k_y = 0, k_z = k_z^{\min} \right) = \omega_{\alpha} \sin \left[ \frac{\pi}{2(N_z + 2)} \right] \dots (4.1)$$

To znači da fononi u tankom filmu poseduju fononski gep iz koga sledi da je aktivaciona temperatura filma

$$T_{ac} = \frac{\hbar\omega_{\alpha;\min}}{k_B} = \frac{2\hbar}{k_B} \sin \left[ \frac{\pi}{2(N_z + 2)} \right] \dots\dots\dots (4.2)$$

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

Vidi se da aktivaciona temperatura opada sa povećanjem debljine filma tj. porastom  $N_z$ . Za izuzetno tanke filmove aktivaciona temperatura je relativno visoka.

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

## 5. LITERATURA

- 1.P.V. Pavlov, Fizika tvrdogog tela, Nauka Moskva 1985.
- 2.A.S. Davidov, Teorija tvrdogog tela, Nauka Moskva 1976.
- 3.LJ. Marković, B.S. Tošić, S. Stojanović, M. Škrinjar, J. P. Šetrajčić Fononi u deformisanim tankim filmovima, Zbornik radova PMF Novi Sad 1992.
- 4.M. Pantić, Fononska stanja u strukturama sa narušenom simetrijom magistarska teza FF PMF Beograd 1993.
- 5.B.S. Tošić, J. P. Šetrajčić, D.Lj. Mirjanić, Z.V. Bundalo, Physica A 184 (1992) 354.