

D-393

UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET
INSTITUT ZA FIZIKU

УНИВЕРЗИТЕТ У НОВОМ САДУ
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ

ПРИМЉЕНО:	27 7 1999
ОРГАНИЗ ЈЕД	Б Р О Ј
0603	9/349

- DIPLOMSKI RAD -

FONONSKI SPEKTRI U SUPERREŠETKAMA

MENTOR

PROF. DR JOVAN ŠETRAJČIĆ

KANDIDAT

DUŠAN ILIĆ

Novi SAD, 1999. godine

Veliku zahvalnost na pomoći i podršci prilikom izrade ovog rada dugujem svom mentoru prof. dr Jovanu Šetrajčiću, koleginicama Iren Junger, Danijeli Šijačić, mr Sladjani Stojković i kolegi mr Igoru Vragoviću. Posebnu zahvalnost na izuzetnom strpljenju i razumevanju dugujem svojim roditeljima.

Sadržaj

1 U v o d	4
2 Fononi u kristalima	5
2.1 Fononi u neograničenim strukturama	5
2.2 Formiranje fononskog modela	6
2.3 Zakon disperzije fonona	7
3 Fononi u kristalnim filmovima	10
3.1 Analiza fononskog modela	10
3.2 Spektri i stanja fonona u filmu	13
4 Fononi u superrešetkama	16
4.1 Model superrešetke	17
4.2 Jednačine kretanja	19
4.3 Zakon disperzije fonona	24
5 Zaključak	28
6 Literatura	29

1 U v o d

Za modernu nauku o materijalima [1,2] danas je najznačajnije precizno strukturiranje materijala do dimenzija reda veličine nanometara, posebno na polju elektronike, optoelektronike i visokotemperaturske superprovodnosti. Teorijska i eksperimentalna istraživanja osobina niskodimenzionalnih sistema (superrešetke¹, tanki filmovi, kvantne žice i kvantne tačke), postala su u poslednjoj deceniji veoma intenzivna, pa bi se moglo reći da predstavljaju jedan od udarnih pravaca istraživanja u savremenoj fizici kondenzovane materije [2-4]. Razlozi interesovanja za ovakve sisteme, kao realnije strukture od neograničenih, su mnogobrojni. Fenomeni povezani sa tako malim dimenzijama dovode do pojave novih i drugačijih, odnosno izmenjenih osobina materijala i specifičnih pojava [1-5] što je interesantno ne samo sa fundamentalnog fizičkog stanovišta, već su takve strukture od šireg praktičnog značaja.

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

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

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

¹Ultratanke slojevite strukture tipa $(AC)_m(BC)_n$, koje sadrže naizmenično m slojeva dvokomponentnog jedinjenja AC i n slojeva jedinjenja BC duž specifičnog pravca rasta su tipičan primer superrešetki [3].

2 Fononi u kristalima

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

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

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

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

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

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

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

2.1 Fononi u neograničenim strukturama

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Pošto sile koje deluju izmedju atoma u kristalu brzo opadaju sa porastom rastojanja $|\vec{n} - \vec{m}|$ izmedju atoma², to se izraz za potencijalnu energiju može napisati na sledeći način:

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

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

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

2.2 Formiranje fononskog modela

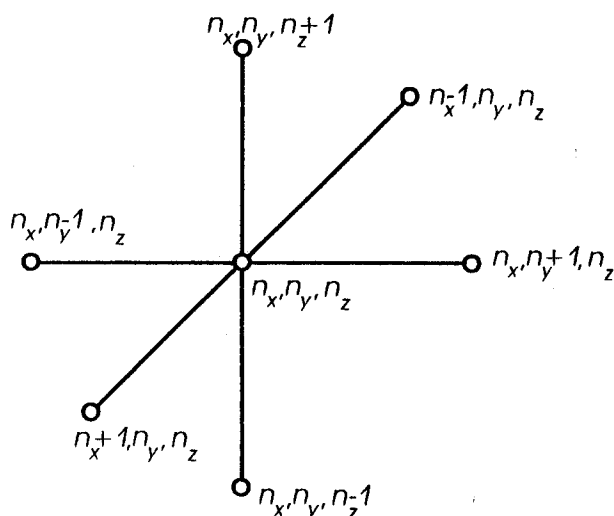
Mada u prirodi nema čistih izotropnih kristala, niti se oni mogu na današnjem nivou tehnologije proizvesti, izučavanje idealnih (beskonačnih) struktura korisno je zbog toga, što se za osnovne fizičke fenomene mogu izračunati njihove globalne karakteristike i dobiti ono što se naziva - kvalitativna slika,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

²Lenard-Džonsov potencijal koji je proporcionalan $A r^{-6} - B r^{-12}$, najpogodniji je kod fonona u slučaju kovalentnih i molekulskih kristala

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

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

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



Slika 2.1: Atom u okruženju najbližih suseda

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

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

pri čemu su:

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

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

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

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

2.3 Zakon disperzije fonona

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

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

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

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

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

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

koja je zadovoljena za:

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

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

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

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

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

i zamenom nadjenih komutatora u jednačinu (2.13) sledi:

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

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

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

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

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

Ova jednakost je ispunjena za:

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

odnosno:

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

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

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

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

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

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

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

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

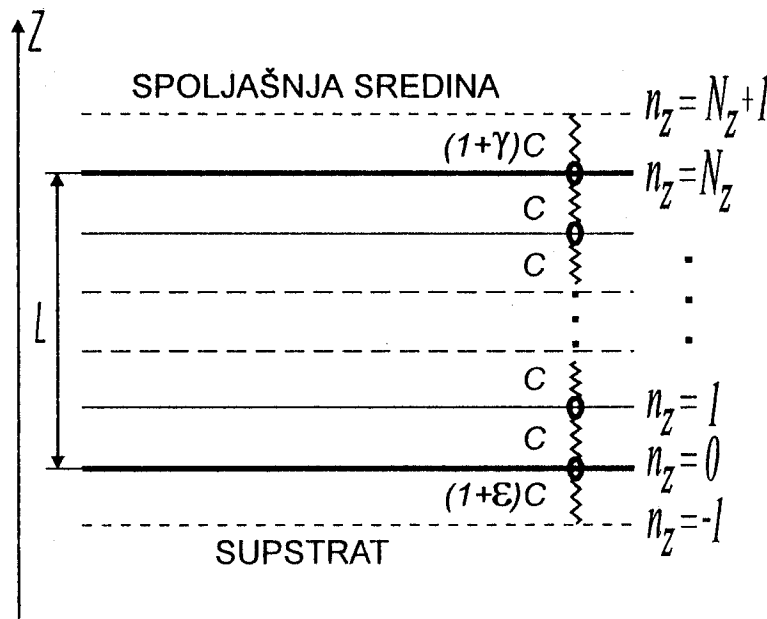
Kvanti mehaničkih pobudjenja sa linearnim zakonom disperzije, tj. osobinom

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

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

3 Fononi u kristalnim filmovima

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



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

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

3.1 Analiza fononskog modela

Posmatra se idealni³ tanki film kubne kristalne strukture načinjen na supstratu nekim tehničko-tehnološkim postupkom (naparavanjem, spaterovanjem i sl.), čiji su osnovni kristalografski podaci:

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

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

$$C_{N_z,N_z+1} = C_{N_z+1,N_z} = (1+\gamma)C, \quad C_{-1,0} = C_{0,-1} = (1+\epsilon)C; \quad \epsilon, \gamma \in [-1.5, +1.5],$$

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

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

³Pojam - idealni, koristi se u smislu nenarušenja kristalne strukture (bez prisustva defekata, primesa i sl.), a ne u smislu njene prostorne neograničenosti.

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

Uzimajući u obzir uslove $C_j = C$, ($j = 0, 1, 2, \dots, N_z - 1, N_z$) i činjenicu da su slojevi za $n_z \leq -1$ i za $n_z \geq N_z + 1$ odsutni, moramo obračunati i sledeće:

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

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

Kada bi bilo: $C_{-1} = C_{N_z+1} = 0$ ($\varepsilon = \gamma = -1$), tada bi granični atomi za $n_z = 0$ i $n_z = N_z$ bili „zamrznuti”, tj. javio bi se efekat „krutih zidova”, a ako bi važio: $C_{-1} = C_{N_z+1} = C$ ($\varepsilon = \gamma = 0$), bio bi to efekat „slobodnih površina” [10,11].

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

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

gde je T - standardan kinetički član. Površinski potencijal interakcije je oblika:

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

Zapreminski potencijal interakcije je onda sledećeg oblika:

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

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

izračunavaju se potrebni komutatori impulsa i hamiltonijana.

Za donju graničnu površinu ($n_z = 0$):

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

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

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

i konačno, za $n_z = N_z$,

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

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

- za $n_z = 0$,

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

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

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

- za $n_z = N_z$,

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

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

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

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

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

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

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

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

$$D_{N_z+1}(\varrho) = \begin{vmatrix} \varrho - \varepsilon & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & \varrho & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \varrho & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \ddots & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & \varrho & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & \varrho & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & \varrho - \gamma \end{vmatrix}_{N_z+1} \tag{3.13}$$

Trivijalnim postupkom, gornja determinanta se može razviti i izraziti preko polinoma Čebiševa:

$$\begin{aligned}
 D_{N_z+1}(\varrho) &= (\varrho - \varepsilon)(\varrho - \gamma) \mathcal{P}_{N_z-1}(\varrho) - (2\varrho - \varepsilon - \gamma) \mathcal{P}_{N_z-2}(\varrho) + \mathcal{P}_{N_z-3}(\varrho) = \\
 &= \mathcal{P}_{N_z+1}(\varrho) - (\varepsilon + \gamma) \mathcal{P}_{N_z}(\varrho) + \varepsilon\gamma \mathcal{P}_{N_z-1}(\varrho)
 \end{aligned} \tag{3.14}$$

(pogledati u [10-12]).

3.2 Spektri i stanja fonona u filmu

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

$$D_{N_z+1}(\varrho; \varepsilon, \gamma) \equiv 0 \implies \varrho = \varrho_\nu(\varepsilon, \gamma); \quad \nu = 1, 2, 3, \dots, N_z + 1. \tag{3.15}$$

Ovaj zadatak u opštem slučaju nije analitički rešiv (može se rešiti numerički za zadate parametre: ε , γ i N_z).

U slučaju modela slobodnih površina [10,11], kada su: $\varepsilon = \gamma = 0$, ovaj problem ima analitičko rešenje. Izraz (3.15) se tada svodi na:

$$\mathcal{D}_{N_z+1}(\varrho) = \varrho^2 \mathcal{P}_{N_z-1}(\varrho) - 2\varrho \mathcal{P}_{N_z-2}(\varrho) + \mathcal{P}_{N_z-3}(\varrho) \quad (3.16)$$

Uzimajući u obzir rekurentnu relaciju za polinome Čebiševa [12], te stavljajući: prvo $n = N_z - 1$, potom $n = N_z - 2$ i na kraju $n = N_z$, izraz (3.16) se svodi na:

$$\mathcal{D}_{N_z+1}(\varrho) = \varrho \mathcal{P}_{N_z}(\varrho) - \mathcal{P}_{N_z-1}(\varrho) \equiv \mathcal{P}_{N_z+1}(\varrho). \quad (3.17)$$

Determinanta (3.13) sistema jednačina (3.11) se izražava direktno preko karakterističnih polinoma Čebiševa reda N_z . Iz uslova (3.15) slede nule Čebiševljevih polinoma (videti [10-12]), a uzimajući u obzir i izraz (3.12), jednostavnim algebarskim transformacijama (uz smenu: $\nu = N_z + 2 - \mu$, što povlači $\omega_\nu(\vec{k}) \rightarrow \omega_\mu(\vec{k})$), dolazi se do izraza koji daje zakon disperzije fonona u tankom (strukturno nedeformisanom) filmu:

$$\mathcal{E}_\mu^\alpha(\vec{k}) \equiv \hbar \omega_\mu^\alpha(\vec{k}) = 2 \sqrt{\mathcal{R}_{xy} + \mathcal{S}_z(\mu)}; \quad \mathcal{E}_\mu^\alpha(\vec{k}) = \frac{E_\mu^\alpha(\vec{k})}{E_0}, \quad E_0 = \hbar \Omega_\alpha; \quad (3.18)$$

$$\mathcal{R}_{xy} \equiv \mathcal{R}_{k_x k_y} = \sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y}{2}; \quad \mathcal{S}_z(\mu) = \sin^2 \frac{ak_z(\mu)}{2}. \quad (3.19)$$

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

$$k_z(\mu) = \frac{\pi}{a} \frac{\mu}{N_z + 2}; \quad \mu = 1, 2, 3, \dots, N_z + 1. \quad (3.20)$$

Pored toga, uočava se da je:

$$k_x^{\min} = k_y^{\min} = 0; \quad k_z^{\min} \equiv k_z(\mu = 1) = \frac{\pi}{a} \frac{1}{N_z + 2} > 0, \quad (3.21)$$

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

$$k_x^{\max} = k_y^{\max} = \frac{\pi}{a}; \quad k_z^{\max} \equiv k_z(\mu = N_z + 1) = \frac{\pi}{a} \frac{N_z + 1}{N_z + 2} < \frac{\pi}{a}. \quad (3.22)$$

Između minimalne i maksimalne vrednosti za k_z , pa prema tome i za $\mathcal{E}_\mu(\vec{k})$, postoji još $N_z - 1$ diskretnih vrednosti⁴.

Upoređujući dobijene rezultate sa odgovarajućim, dobijenim za idealne beskonačne strukture [1-4], može se zaključiti da sve tri akustičke frekvencije u masivnim strukturama teže nuli kada \vec{k} teži nuli (tj. kad $(k_x, k_y, k_z) \rightarrow 0$), dok su minimalne frekvencije u tankom filmu (kad $(k_x, k_y) \rightarrow 0$ i kad $k_z \rightarrow k_z^{\min}$) date kao:

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

To znači da fononi u tankim filmovima poseduju „donji” energetski gep:

$$\Delta_1 \equiv \Delta_{\min} = \hbar \omega_{\min}^\alpha = E_{\min}^f - E_{\min}^b = 2 E_0 \sin \left[\frac{\pi}{2(N_z + 2)} \right] \quad (3.23)$$

⁴ Ukupan broj mogućih vrednosti kvaziimpulsa k_z jednak je broju energetskih i dvodimenzionih podzona: $N_z + 1$.

i „gornji” energetski gep:

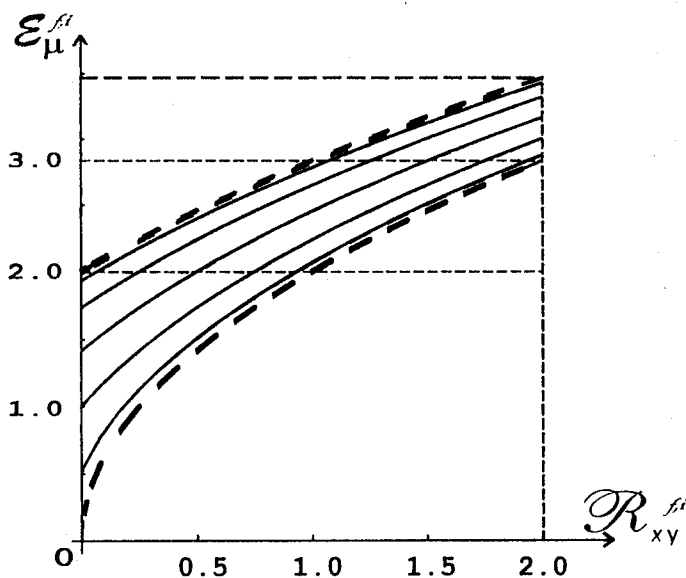
$$\Delta_2 \equiv \Delta_{max} = \hbar \omega_{max}^\alpha = \left(E_{max}^b - E_{max}^f \right)_{k_x=k_y=0} = 2 E_0 \left[1 - \sin \left(\frac{\pi}{2} \frac{N_z + 1}{N_z + 2} \right) \right], \quad (3.24)$$

odnosno, da je energetska zona (koja obuhvata sve dvodimenzione podzone) fonona u filmu uža od odgovarajuće „balkovske” za veličinu zbira uočenih gepova:

$$\mathcal{W}_f = \mathcal{W}_b - (\Delta_1 + \Delta_2) = 2 E_0 \sin \left(\frac{\pi}{2} \frac{N_z + 1}{N_z + 2} \right) \quad (3.25)$$

(indeks f označava film, a b - neograničenu strukturu).

Na osnovu ovih rezultata zakon disperzije (3.18) grafički je prikazan na slici 3.2 i to: za idealne beskonačne strukture (2.19) - isprekidanim linijama, izmedju kojih je on kontinualan, i za tanki film (3.18) - punim linijama, on je diskretan.



Slika 3.2: Fononski spektar $\mathcal{E} = \mathcal{E}_\mu(R_{xy})$

Primetni su gepovi i energetska diskretnost (za film), zatim E_{min}^f , E_{max}^f i još $N_z - 1$ -a dozvoljena vrednost izmedju njih koji su isključiva posledica postojanja prostornih granica.



4 Fononi u superrešetkama

Superrešetke su veštački formirane strukture, periodične u jednom pravcu, sa periodom koji dvadesetak puta prevazilazi konstantu kristalne rešetke [1,2]. Postoje dva osnovna tipa superrešetki: dopirane i kompozicione.

Dopirane superrešetke dobijaju se periodičnim naizmeničnim dopiranjem poluprovodničkog materijala akceptorskim i donorskim primesama, usled čega dolazi do krivljenja energetske zona i formiranja jednodimenzionog periodičnog potencijala. Kompozicione superrešetke dobijaju se naizmeničnom izradom tankih monokristalnih slojeva dve vrste poluprovodničkih materijala.

U odnosu na kompozicione, dopirane superrešetke poseduju prednost jer ne zahtevaju usaglašenost rešetkinih konstanti. Pored toga, one poseduju još jednu interesantnu osobinu: indirektni energetski procep u realnom prostoru (elektroni i šupljine su prostorno razdvojeni). Iz tehnoloških razloga, kod ovih superrešetki ne mogu se ostvariti periodi manji od nekoliko desetina nanometara, dok je to kod kompozicionih moguće. Da bi se dobile dovoljno duboke jame, potrebno je izvršiti dopiranje vrlo visokom koncentracijom primesa. Kod kompozicionih superrešetki jame se ostvaruju diskontinuitetima provodne (valentne) zone, a potrebno dopiranje je znatno manje. Zbog toga se kompozicione superrešetke češće primenjuju od dopiranih.

Kod superrešetke, pored trodimenzione zavisnosti potencijalne energije koja se intenzivno menja u okviru konstante rešetke, postoji dodatna periodična jednodimenziona zavisnost potencijalne energije koja se vrlo sporo menja na domenu konstante rešetke. Ova dodatna sporo promenljiva zavisnost je uzrok da se dno (vrh) provodne (valentne) zone cepa na niz dozvoljenih podzona [1,2,4]. Ovako drastično odstupanje strukture provodne (valentne) zone od balkovske uzrok je da se i makroskopski parametri superrešetki bitno razlikuju od balkovskih. Sporopromenljiva zavisnost potencijalne energije kod superrešetki se može relativno jednostavno menjati, na primer promenom debljine polaznih materijala, čime se menjaju i njihove makroskopske osobine. Na ovaj način superrešetke predstavljaju nove materijale, čije se osobine, bar u principu, mogu podešavati u željenom opsegu. Ovo je osnovni razlog proučavanja superrešetki (a i ostalih nanostrukture).

Superrešetke [1,2] se danas primenjuju za izradu:

- poluprovodničkih laserskih dioda i lasera,
- detektora infracrvenog zračenja,
- tranzistora sa efektom polja.

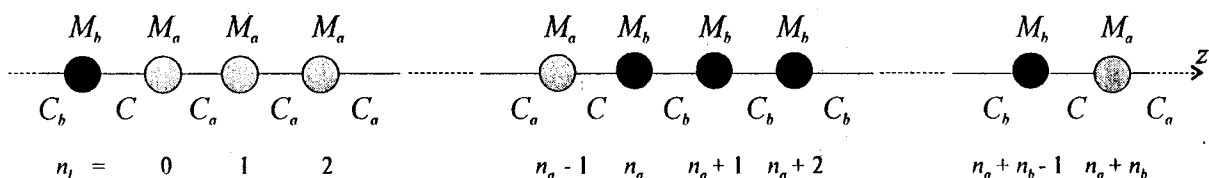
Potencijalne primene ovih struktura koje se mogu uskoro očekivati [1,2] su:

- infracrveni detektori na bazi unutarzonskih prelaza,
- izvori mikrotalasnog zračenja,
- diode sa rezonantnim tunelovanjem,
- unipolarni poluprovodnički laseri (sa unutarzonskim prelazima),
- elektrooptički modulatori.

4.1 Model superrešetke

Ultratanke slojevite strukture tipa $(AC)_m(BC)_n$, koje sadrže naizmenično m slojeva dvokomponentnog jedinjenja AC i n slojeva jedinjenja BC , duž specifičnog pravca rasta, su tipičan primer superrešetki [4,5].

U ovom radu posmatrana je kristalna superrešetka formirana od naizmenično raspoređenih n_a slojeva jedne i n_b slojeva druge vrste atoma duž z -pravca, koja je duž x i y pravaca neograničena (na slici 3.1 prikazan je raspored atoma superrešetke duž z -pravca). Da bi bio moguć spoj slojeva sačinjenih od različitih atoma moraju konstante rešetke duž x i y pravaca, respektivno, biti jednake, tj. $a_x^a = a_x^b = a_x$ i $a_y^a = a_y^b = a_y$, dok duž z -pravca mogu biti različite ($a_z^a = a^a \neq a_z^b = a^b$ i $a_z^{a-b} = a$).



Slika 3.1: Raspored atoma u superrešetki

Uvodimo sledeću simboličku oznaku:

$$\vec{n} \equiv \{n_x, n_y, n_z\}, \quad n_{x/y/z} \in \left[-\frac{N_{x/y/z}}{2}, +\frac{N_{x/y/z}}{2} \right],$$

pri čemu su:

- $n_{x/y}$ - brojač atomskog čvora po x , odnosno y -pravcu,
- n_z - brojač položaja osnovnog motiva superrešetke (z -pravac),
- n_l - brojač položaja čvora u osnovnom motivu.

Hamiltonijan fononskog podsistema superrešetke ponovo je, kao i u slučaju kristalnog filma (3.1), moguće napisati u obliku:

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

s tim što je u ovom slučaju pogodno izvršiti njegovo razdvajanje.

- Operator kinetičke energije može se predstaviti u obliku:

$$T = T_1 + T_2, \quad (4.2)$$

$$T_1 = \sum_{\vec{n}, \alpha} \sum_{n_l=0}^{n_a-1} \frac{p_{\vec{n}, n_l; \alpha}^{2(a)}}{2M_a}; \quad (4.3)$$

$$T_2 = \sum_{\vec{n}, \alpha} \sum_{n_l=n_a}^{n_a+n_b-1} \frac{p_{\vec{n}, n_l; \alpha}^{2(b)}}{2M_b}. \quad (4.4)$$

- Površinski potencijal interakcije može se napisati u obliku sume:

$$V_{eff}^P = V_1^P + V_2^P + V_3^P + V_4^P, \quad (4.5)$$

čiji se članovi odnose respektivno na površine $n_l = 0$, $n_a - 1$, n_a i $n_a + n_b - 1$, tj.

$$\begin{aligned} V_1^P &= \sum_{\vec{n}} \left[\frac{C_a^x}{4} \left\{ (u_{n_x, n_y, n_z, 0} - u_{n_x+1, n_y, n_z, 0})^2 + (u_{n_x, n_y, n_z, 0} - u_{n_x-1, n_y, n_z, 0})^2 \right\} + \right. \\ &+ \frac{C_a^y}{4} \left\{ (u_{n_x, n_y, n_z, 0} - u_{n_x, n_y+1, n_z, 0})^2 + (u_{n_x, n_y, n_z, 0} - u_{n_x, n_y-1, n_z, 0})^2 \right\} + \\ &\left. + \frac{C_a^z}{2} (u_{n_x, n_y, n_z, 0} - u_{n_x, n_y, n_z, 1})^2 + \frac{C}{2} (u_{n_x, n_y, n_z, 0} - u_{n_x, n_y, n_z-1, n_a+n_b-1})^2 \right]; \end{aligned} \quad (4.6)$$

$$\begin{aligned} V_2^P &= \sum_{\vec{n}} \left[\frac{C_a^x}{4} \left\{ (u_{n_x, n_y, n_z, n_a-1} - u_{n_x+1, n_y, n_z, n_a-1})^2 + (u_{n_x, n_y, n_z, n_a-1} - u_{n_x-1, n_y, n_z, n_a-1})^2 \right\} + \right. \\ &+ \frac{C_a^y}{4} \left\{ (u_{n_x, n_y, n_z, n_a-1} - u_{n_x, n_y+1, n_z, n_a-1})^2 + (u_{n_x, n_y, n_z, n_a-1} - u_{n_x, n_y-1, n_z, n_a-1})^2 \right\} + \\ &\left. + \frac{C_a^z}{2} (u_{n_x, n_y, n_z, n_a-1} - u_{n_x, n_y, n_z, n_a-2})^2 + \frac{C}{2} (u_{n_x, n_y, n_z, n_a-1} - u_{n_x, n_y, n_z-1, n_a})^2 \right]; \end{aligned} \quad (4.7)$$

$$\begin{aligned} V_3^P &= \sum_{\vec{n}} \left[\frac{C_b^x}{4} \left\{ (u_{n_x, n_y, n_z, n_a} - u_{n_x+1, n_y, n_z, n_a})^2 + (u_{n_x, n_y, n_z, n_a} - u_{n_x-1, n_y, n_z, n_a})^2 \right\} + \right. \\ &+ \frac{C_b^y}{4} \left\{ (u_{n_x, n_y, n_z, n_a} - u_{n_x, n_y+1, n_z, n_a})^2 + (u_{n_x, n_y, n_z, n_a} - u_{n_x, n_y-1, n_z, n_a})^2 \right\} + \\ &\left. + \frac{C_b^z}{2} (u_{n_x, n_y, n_z, n_a} - u_{n_x, n_y, n_z, n_a+1})^2 + \frac{C}{2} (u_{n_x, n_y, n_z, n_a} - u_{n_x, n_y, n_z, n_a-1})^2 \right]; \end{aligned} \quad (4.8)$$

$$\begin{aligned} V_4^P &= \sum_{\vec{n}} \left[\frac{C_b^x}{4} \left\{ (u_{n_x, n_y, n_z, n_a+n_b-1} - u_{n_x+1, n_y, n_z, n_a+n_b-1})^2 + \right. \right. \\ &+ \left. (u_{n_x, n_y, n_z, n_a+n_b-1} - u_{n_x-1, n_y, n_z, n_a+n_b-1})^2 \right\} + \\ &+ \frac{C_b^y}{4} \left\{ (u_{n_x, n_y, n_z, n_a+n_b-1} - u_{n_x, n_y+1, n_z, n_a+n_b-1})^2 + \right. \\ &+ \left. (u_{n_x, n_y, n_z, n_a+n_b-1} - u_{n_x, n_y-1, n_z, n_a+n_b-1})^2 \right\} + \\ &\left. + \frac{C_b^z}{2} (u_{n_x, n_y, n_z, n_a+n_b-1} - u_{n_x, n_y, n_z, n_a+n_b-2})^2 + \frac{C}{2} (u_{n_x, n_y, n_z, n_a+n_b-1} - u_{n_x, n_y, n_z+1, 0})^2 \right]. \end{aligned} \quad (4.9)$$

- Zapreminski potencijal interakcije može se predstaviti u obliku:

$$V_{eff}^Z = V_1^Z + V_2^Z, \quad (4.10)$$

$$\begin{aligned} V_1^Z &= \sum_{\vec{n}} \sum_{n_l=1}^{n_a-2} \left[\frac{C_a^x}{4} \left\{ (u_{n_x, n_y, n_z, n_l} - u_{n_x+1, n_y, n_z, n_l})^2 + (u_{n_x, n_y, n_z, n_l} - u_{n_x-1, n_y, n_z, n_l})^2 \right\} + \right. \\ &+ \frac{C_a^y}{4} \left\{ (u_{n_x, n_y, n_z, n_l} - u_{n_x, n_y+1, n_z, n_l})^2 + (u_{n_x, n_y, n_z, n_l} - u_{n_x, n_y-1, n_z, n_l})^2 \right\} + \\ &\left. + \frac{C_a^z}{4} \left\{ (u_{n_x, n_y, n_z, n_l} - u_{n_x, n_y, n_z, n_l+1})^2 + (u_{n_x, n_y, n_z, n_l} - u_{n_x, n_y, n_z, n_l-1})^2 \right\} \right]; \end{aligned} \quad (4.11)$$

$$\begin{aligned} V_2^Z &= \sum_{\vec{n}} \sum_{n_l=n_a+1}^{n_a+n_b-2} \left[\frac{C_b^x}{4} \left\{ (u_{n_x, n_y, n_z, n_l} - u_{n_x+1, n_y, n_z, n_l})^2 + (u_{n_x, n_y, n_z, n_l} - u_{n_x-1, n_y, n_z, n_l})^2 \right\} + \right. \\ &+ \frac{C_b^y}{4} \left\{ (u_{n_x, n_y, n_z, n_l} - u_{n_x, n_y+1, n_z, n_l})^2 + (u_{n_x, n_y, n_z, n_l} - u_{n_x, n_y-1, n_z, n_l})^2 \right\} + \\ &\left. + \frac{C_b^z}{4} \left\{ (u_{n_x, n_y, n_z, n_l} - u_{n_x, n_y, n_z, n_l+1})^2 + (u_{n_x, n_y, n_z, n_l} - u_{n_x, n_y, n_z, n_l-1})^2 \right\} \right]. \end{aligned} \quad (4.12)$$

S obzirom da superrešetka predstavlja periodičnu kristalnu strukturu, za proizvoljnu funkciju položaja važe uslovi cikličnosti po x i y indeksima pomoću kojih se dobijaju dozvoljene vrednosti x i y komponente talasnog vektora:

$$f_{m_x m_y m_z m_l + N_{x/y}} = f_{m_x m_y m_z m_l}, \quad (4.13)$$

na osnovu čega sledi:

$$e^{iN_{x/y}k_x/y} = e^{2\pi\nu_x/y}. \quad (4.14)$$

Na analogan način se može napisati i ciklični uslov po z -koordinati:

$$f_{m_x m_y m_z m_l + (n_a + n_b)N_z} = f_{m_x m_y m_z m_l}, \quad (4.15)$$

odakle se dobija:

$$e^{i(n_a + n_b)N_z k_z \bar{a}} = e^{2\pi\nu_z}. \quad (4.16)$$

Prebrojavanje dozvoljenih vrednosti z -komponente talasnog vektora, tj. k_z vrši se brojačem $\nu_z \in 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm N_z/2$ čime se definišu granice prve Brillouinove zone duž z -pravca:

$$k_z \in \left[-\frac{\pi}{(n_a + n_b)\bar{a}}, +\frac{\pi}{(n_a + n_b)\bar{a}} \right], \quad (4.17)$$

gde je uvedena oznaka \bar{a} za srednju vrednost konstante rešetke duž z -pravca:

$$\bar{a} = \frac{(n_a - 1)a^a + (n_b - 1)a^b + 2a}{n_a + n_b}. \quad (4.18)$$

4.2 Jednačine kretanja

Zakon disperzije fonona tražimo pomoću Grinove funkcije oblika:

$$G_{\vec{n}, n_l; \vec{m}, m_l}(t - t') \equiv \langle \langle u_{\vec{n}, n_l}(t) | u_{\vec{m}, m_l}(t') \rangle \rangle = \Theta(t - t') \langle [u_{\vec{n}, n_l}(t), u_{\vec{m}, m_l}(t')] \rangle, \quad (4.19)$$

na način opisan u paragrafu 2.3, tako da dobijamo:

$$-M_i \omega^2 G_{\vec{n}, n_l; \vec{m}, m_l}(\omega) = -\frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{\vec{n}, \vec{m}} \delta_{n_l, m_l} + \frac{1}{i\hbar} \langle \langle [p_{\vec{n}, n_l}, H] | u_{\vec{m}, m_l} \rangle \rangle_\omega, \quad (4.20)$$

gde je $M_i \in (M_a, M_b)$. Sledeći korak sastoji se u izračunavanju komutatora koji figurišu u višoj Grinovoj funkciji, vodeći računa o tome da je:

$$H = T_1 + T_2 + V_1^P + V_2^P + V_3^P + V_4^P + V_1^Z + V_2^Z. \quad (4.21)$$

Odmah se vidi da je:

$$[p_{m_x, m_y, m_z, m_l}, T_1] = \sum_{\vec{n}; \alpha} \sum_{n_l=0}^{n_a-1} \frac{1}{2M_a} [p_{m_x, m_y, m_z, m_l}, p_{\alpha; n_x, n_y, n_z, n_l}^2] = 0; \quad (4.22)$$

$$[p_{m_x, m_y, m_z, m_l}, T_2] = \sum_{\vec{n}; \alpha} \sum_{n_l=n_a}^{n_a+n_b-1} \frac{1}{2M_b} [p_{m_x, m_y, m_z, m_l}, p_{\alpha; n_x, n_y, n_z, n_l}^2] = 0. \quad (4.23)$$

Preostale komutatore izračunavamo posebno za atome graničnih površina između slojeva, a posebno za atome unutar svakog sloja.

a) $n_l = 0$

$$\begin{aligned}
C_1 &= [p_{m_x, m_y, m_z, 0}, H] \equiv [p_{m_x, m_y, m_z, 0}, V_1^P] = \\
&= \sum_{\vec{n}} \left\{ \frac{C_a^x}{4} \left\{ [p_{m_x, m_y, m_z, 0}, (u_{n_x, n_y, n_z, 0} - u_{n_x+1, n_y, n_z, 0})^2] + \right. \right. \\
&\quad + \left. [p_{m_x, m_y, m_z, 0}, (u_{n_x, n_y, n_z, 0} - u_{n_x-1, n_y, n_z, 0})^2] \right\} + \\
&\quad + \frac{C_a^y}{4} \left\{ [p_{m_x, m_y, m_z, 0}, (u_{n_x, n_y, n_z, 0} - u_{n_x, n_y+1, n_z, 0})^2] + \right. \\
&\quad + \left. [p_{m_x, m_y, m_z, 0}, (u_{n_x, n_y, n_z, 0} - u_{n_x, n_y-1, n_z, 0})^2] \right\} + \\
&\quad + \frac{C_a^z}{2} [p_{m_x, m_y, m_z, 0}, (u_{n_x, n_y, n_z, 0} - u_{n_x, n_y, n_z, 1})^2] + \\
&\quad + \left. \frac{C}{2} [p_{m_x, m_y, m_z, 0}, (u_{n_x, n_y, n_z, 0} - u_{n_x, n_y, n_z-1, n_a+n_b-1})^2] \right\} = \\
&= -i\hbar \{ C_a^x (2u_{m_x, m_y, m_z, 0} - u_{m_x+1, m_y, m_z, 0} - u_{m_x-1, m_y, m_z, 0}) + \\
&\quad + C_a^y (2u_{m_x, m_y, m_z, 0} - u_{m_x, m_y+1, m_z, 0} - u_{m_x, m_y-1, m_z, 0}) + \\
&\quad + C_a^z (u_{m_x, m_y, m_z, 0} - u_{m_x, m_y, m_z, 1}) + C(u_{m_x, m_y, m_z, 0} - u_{m_x, m_y, m_z-1, n_a+n_b-1}) \}. \tag{4.24}
\end{aligned}$$

b) $1 \leq n_l \leq n_a - 2$

$$\begin{aligned}
C_2 &= [p_{m_x, m_y, m_z, m_l}, H] \equiv [p_{m_x, m_y, m_z, m_l}, V_1^Z] = \\
&= -i\hbar \{ C_a^x (2u_{m_x, m_y, m_z, m_l} - u_{m_x+1, m_y, m_z, m_l} - u_{m_x-1, m_y, m_z, m_l}) + \\
&\quad + C_a^y (2u_{m_x, m_y, m_z, m_l} - u_{m_x, m_y+1, m_z, m_l} - u_{m_x, m_y-1, m_z, m_l}) + \\
&\quad + C_a^z (2u_{m_x, m_y, m_z, m_l} - u_{m_x, m_y, m_z, m_l+1} - u_{m_x, m_y, m_z, m_l-1}) \}, \tag{4.25}
\end{aligned}$$

c) $n_l = n_a - 1$

$$\begin{aligned}
C_3 &= [p_{m_x, m_y, m_z, n_a-1}, H] \equiv [p_{m_x, m_y, m_z, n_a-1}, V_2^P] = \\
&= -i\hbar \{ C_a^x (2u_{m_x, m_y, m_z, n_a-1} - u_{m_x+1, m_y, m_z, n_a-1} - u_{m_x-1, m_y, m_z, n_a-1}) + \\
&\quad + C_a^y (2u_{m_x, m_y, m_z, n_a-1} - u_{m_x, m_y+1, m_z, n_a-1} - u_{m_x, m_y-1, m_z, n_a-1}) + \\
&\quad + C_a^z (u_{m_x, m_y, m_z, n_a-1} - u_{m_x, m_y, m_z, n_a-2}) + C(u_{m_x, m_y, m_z, n_a-1} - u_{m_x, m_y, m_z, n_a}) \}. \tag{4.26}
\end{aligned}$$

d) $n_l = n_a$

$$\begin{aligned}
C_4 &= [p_{m_x, m_y, m_z, n_a}, H] \equiv [p_{m_x, m_y, m_z, n_a}, V_3^P] = \\
&= -i\hbar \{ C_b^x (2u_{m_x, m_y, m_z, n_a} - u_{m_x+1, m_y, m_z, n_a} - u_{m_x-1, m_y, m_z, n_a}) + \\
&\quad + C_b^y (2u_{m_x, m_y, m_z, n_a} - u_{m_x, m_y+1, m_z, n_a} - u_{m_x, m_y-1, m_z, n_a}) + \\
&\quad + C_b^z (u_{m_x, m_y, m_z, n_a} - u_{m_x, m_y, m_z, n_a+1}) + C(u_{m_x, m_y, m_z, n_a} - u_{m_x, m_y, m_z, n_a-1}) \}. \tag{4.27}
\end{aligned}$$

e) $n_a + 1 \leq n_l \leq n_a + n_b - 2$

$$\begin{aligned}
C_5 &= [p_{m_x, m_y, m_z, m_l}, H] \equiv [p_{m_x, m_y, m_z, m_l}, V_2^Z] = \\
&= -i\hbar \{ C_b^x (2u_{m_x, m_y, m_z, m_l} - u_{m_x+1, m_y, m_z, m_l} - u_{m_x-1, m_y, m_z, m_l}) + \\
&\quad + C_b^y (2u_{m_x, m_y, m_z, m_l} - u_{m_x, m_y+1, m_z, m_l} - u_{m_x, m_y-1, m_z, m_l}) + \\
&\quad + C_b^z (2u_{m_x, m_y, m_z, m_l} - u_{m_x, m_y, m_z, m_l+1} - u_{m_x, m_y, m_z, m_l-1}) \}. \tag{4.28}
\end{aligned}$$

f) $n_l = n_a + n_b - 1$

$$\begin{aligned}
C_6 &= [p_{m_x, m_y, m_z, n_a + n_b - 1}, H] \equiv [p_{m_x, m_y, m_z, n_a + n_b - 1}, V_4^P] = \\
&= -i\hbar \{ C_b^x (2u_{m_x, m_y, m_z, n_a + n_b - 1} - u_{m_x + 1, m_y, m_z, n_a + n_b - 1} - u_{m_x - 1, m_y, m_z, n_a + n_b - 1}) + \\
&+ C_b^y (2u_{m_x, m_y, m_z, n_a + n_b - 1} - u_{m_x, m_y + 1, m_z, n_a + n_b - 1} - u_{m_x, m_y - 1, m_z, n_a + n_b - 1}) + \\
&+ C_b^z (u_{m_x, m_y, m_z, n_a + n_b - 1} - u_{m_x, m_y, m_z, n_a + n_b - 2}) + \\
&+ C(u_{m_x, m_y, m_z, n_a + n_b - 1} - u_{m_x, m_y, m_z + 1, 0}) \}. \quad (4.29)
\end{aligned}$$

Zamenom nadjenih komutatora (uz smenu $\vec{m} \rightarrow \vec{n}$, $m_l \rightarrow n_l$) u jednačinu (4.20) dobija se:

a) $n_l = 0$

$$\begin{aligned}
- M_a \omega^2 G_{n_x, n_y, n_z, 0; \vec{m}, m_l} &= -\frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{\vec{n}, \vec{m}} \delta_{0, m_l} - \left\{ (2C_a^x + 2C_a^y + C_a^z + C) G_{n_x, n_y, n_z, 0; \vec{m}, m_l} - \right. \\
- C_a^x [G_{n_x + 1, n_y, n_z, 0; \vec{m}, m_l} + G_{n_x - 1, n_y, n_z, 0; \vec{m}, m_l}] - C_a^y [G_{n_x, n_y + 1, n_z, 0; \vec{m}, m_l} + \\
+ G_{n_x, n_y - 1, n_z, 0; \vec{m}, m_l}] - C_a^z G_{n_x, n_y, n_z, 1; \vec{m}, m_l} - C G_{n_x, n_y, n_z - 1, n_a + n_b - 1; \vec{m}, m_l} \left. \right\}, \quad (4.30)
\end{aligned}$$

b) $1 \leq n_l \leq n_a - 2$

$$\begin{aligned}
- M_a \omega^2 G_{n_x, n_y, n_z, n_l; \vec{m}, m_l} &= -\frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{\vec{n}, \vec{m}} \delta_{n_l, m_l} - \left\{ 2(C_a^x + C_a^y + C_a^z) G_{n_x, n_y, n_z, n_l; \vec{m}, m_l} - \right. \\
- C_a^x [G_{n_x + 1, n_y, n_z, n_l; \vec{m}, m_l} + G_{n_x - 1, n_y, n_z, n_l; \vec{m}, m_l}] - C_a^y [G_{n_x, n_y + 1, n_z, n_l; \vec{m}, m_l} + \\
+ G_{n_x, n_y - 1, n_z, n_l; \vec{m}, m_l}] - C_a^z [G_{n_x, n_y, n_z, n_l + 1; \vec{m}, m_l} + G_{n_x, n_y, n_z, n_l - 1; \vec{m}, m_l}] \left. \right\}, \quad (4.31)
\end{aligned}$$

c) $n_l = n_a - 1$

$$\begin{aligned}
- M_a \omega^2 G_{n_x, n_y, n_z, n_a - 1; \vec{m}, m_l} &= -\frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{\vec{n}, \vec{m}} \delta_{n_a - 1, m_l} - \left\{ (2C_a^x + 2C_a^y + C_a^z + C) \times \right. \\
\times G_{n_x, n_y, n_z, n_a - 1; \vec{m}, m_l} - C_a^x [G_{n_x + 1, n_y, n_z, n_a - 1; \vec{m}, m_l} + G_{n_x - 1, n_y, n_z, n_a - 1; \vec{m}, m_l}] - \\
- C_a^y [G_{n_x, n_y + 1, n_z, n_a - 1; \vec{m}, m_l} + G_{n_x, n_y - 1, n_z, n_a - 1; \vec{m}, m_l}] - \\
- C_a^z G_{n_x, n_y, n_z, n_a - 2; \vec{m}, m_l} - C G_{n_x, n_y, n_z, n_a; \vec{m}, m_l} \left. \right\}, \quad (4.32)
\end{aligned}$$

d) $n_l = n_a$

$$\begin{aligned}
- M_b \omega^2 G_{n_x, n_y, n_z, n_a; \vec{m}, m_l} &= -\frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{\vec{n}, \vec{m}} \delta_{n_a, m_l} - \left\{ (2C_b^x + 2C_b^y + C_b^z + C) G_{n_x, n_y, n_z, n_a; \vec{m}, m_l} - \right. \\
- C_b^x [G_{n_x + 1, n_y, n_z, n_a; \vec{m}, m_l} + G_{n_x - 1, n_y, n_z, n_a; \vec{m}, m_l}] - C_b^y [G_{n_x, n_y + 1, n_z, n_a; \vec{m}, m_l} + \\
+ G_{n_x, n_y - 1, n_z, n_a; \vec{m}, m_l}] - C_b^z G_{n_x, n_y, n_z, n_a + 1; \vec{m}, m_l} - C G_{n_x, n_y, n_z, n_a - 1; \vec{m}, m_l} \left. \right\}, \quad (4.33)
\end{aligned}$$

e) $n_a + 1 \leq n_l \leq n_a + n_b - 2$

$$\begin{aligned}
- M_b \omega^2 G_{n_x, n_y, n_z, n_l; \vec{m}, m_l} &= -\frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{\vec{n}, \vec{m}} \delta_{n_l, m_l} - \left\{ 2(C_b^x + C_b^y + C_b^z) G_{n_x, n_y, n_z, n_l; \vec{m}, m_l} - \right. \\
- C_b^x [G_{n_x + 1, n_y, n_z, n_l; \vec{m}, m_l} + G_{n_x - 1, n_y, n_z, n_l; \vec{m}, m_l}] - C_b^y [G_{n_x, n_y + 1, n_z, n_l; \vec{m}, m_l} + \\
+ G_{n_x, n_y - 1, n_z, n_l; \vec{m}, m_l}] - C_b^z [G_{n_x, n_y, n_z, n_l + 1; \vec{m}, m_l} + G_{n_x, n_y, n_z, n_l - 1; \vec{m}, m_l}] \left. \right\}, \quad (4.34)
\end{aligned}$$

f) $n_l = n_a + n_b - 1$

$$\begin{aligned}
 & - M_b \omega^2 G_{n_x, n_y, n_z, n_a + n_b - 1; \vec{m}, m_l} = -\frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{\vec{n}, \vec{m}} \delta_{n_a + n_b - 1, m_l} - \left\{ (2C_b^x + 2C_b^y + C_b^z + C) \times \right. \\
 & \times G_{n_x, n_y, n_z, n_a + n_b - 1; \vec{m}, m_l} - C_b^x \left[G_{n_x + 1, n_y, n_z, n_a + n_b - 1; \vec{m}, m_l} + G_{n_x - 1, n_y, n_z, n_a + n_b - 1; \vec{m}, m_l} \right] - \\
 & - C_b^y \left[G_{n_x, n_y + 1, n_z, n_a + n_b - 1; \vec{m}, m_l} + G_{n_x, n_y - 1, n_z, n_a + n_b - 1; \vec{m}, m_l} \right] - \\
 & \left. - C_b^z G_{n_x, n_y, n_z, n_a + n_b - 2; \vec{m}, m_l} - C G_{n_x, n_y, n_z + 1, 0; \vec{m}, m_l} \right\}. \quad (4.35)
 \end{aligned}$$

Zbog narušenja translacione invarijantnosti posmatranog sistema uvodi se delimična prostorna Furije transformacija po indeksima x, y i z (jer je po indeksu l translaciona simetrija narušena)

$$G_{\vec{n}, n_l; \vec{m}, m_l}(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} G_{n_l; m_l} e^{i[a_x k_x (n_x - m_x) + a_y k_y (n_y - m_y) + \bar{a}(n_a + n_b) k_z (n_z - m_z) + J]}, \quad (4.36)$$

gde je $N = N_x N_y N_z$, $\vec{k} \equiv \{k_x, k_y, k_z\}$ i:

$$J = \begin{cases} 1. a^a k_z (n_l - m_l) & , \quad n_l - m_l < n_a \\ 2. a^a k_z (n_a - 1) + a k_z & , \quad n_l - m_l = n_a \\ 3. a^a k_z (n_a - 1) + a k_z + a^b k_z (n_l - m_l - n_a) & , \quad n_a < n_l - m_l < n_a + n_b \\ 4. a^a k_z (n_a - 1) + a^b k_z (n_b - 1) + 2a k_z & , \quad n_l - m_l = n_a + n_b \end{cases} \quad (4.37)$$

Njenom primenom na sloj $n_l = 0$ dobija se da su:

$$\begin{aligned}
 G_{n_x, n_y, n_z, 0; \vec{m}, m_l} &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} G_{0; m_l} e^{i[a_x k_x (n_x - m_x) + a_y k_y (n_y - m_y) + \bar{a}(n_a + n_b) k_z (n_z - m_z)]} \\
 G_{n_x, n_y, n_z, 1; \vec{m}, m_l} &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} G_{1; m_l} e^{i[a_x k_x (n_x - m_x) + a_y k_y (n_y - m_y) + \bar{a}(n_a + n_b) k_z (n_z - m_z)]} e^{ia^a k_z} \\
 G_{n_x, n_y, n_z - 1, n_a + n_b - 1; \vec{m}, m_l} &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} G_{n_a + n_b - 1; m_l} e^{i[a_x k_x (n_x - m_x) + a_y k_y (n_y - m_y) + \bar{a}(n_a + n_b) k_z (n_z - m_z)]} e^{-iak_z} \\
 G_{n_x \pm 1, n_y, n_z, 0; \vec{m}, m_l} &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} G_{0; m_l} e^{i[a_x k_x (n_x - m_x) + a_y k_y (n_y - m_y) + \bar{a}(n_a + n_b) k_z (n_z - m_z)]} e^{\pm ia_x k_x} \\
 G_{n_x, n_y \pm 1, n_z, 0; \vec{m}, m_l} &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} G_{0; m_l} e^{i[a_x k_x (n_x - m_x) + a_y k_y (n_y - m_y) + \bar{a}(n_a + n_b) k_z (n_z - m_z)]} e^{\pm ia_y k_y},
 \end{aligned}$$

tako da odgovarajuća jednačina kretanja (4.30) postaje:

$$\begin{aligned}
 & \frac{M_a}{N} \sum_{\vec{k}} e^{i[a_x k_x (n_x - m_x) + a_y k_y (n_y - m_y) + \bar{a}(n_a + n_b) k_z (n_z - m_z)]} \left\{ \frac{i\hbar}{2\pi M_a} \delta_{0, m_l} - \omega^2 G_{0; m_l} + \right. \\
 & + \frac{1}{M_a} (2C_a^x + 2C_a^y + C_a^z + C) G_{0; m_l} - \frac{C_a^x}{M_a} (e^{ia_x k_x} + e^{-ia_x k_x}) G_{0; m_l} - \\
 & \left. - \frac{C_a^y}{M_a} (e^{ia_y k_y} + e^{-ia_y k_y}) G_{0; m_l} - \frac{C_a^z}{M_a} e^{ia^a k_z} G_{1; m_l} - \frac{C}{M_a} e^{-iak_z} G_{n_a + n_b - 1; m_l} \right\} = 0,
 \end{aligned}$$

odnosno,

$$\begin{aligned}
 & \left[\omega^2 - 4(\Omega_{a_x}^2 \sin^2 \frac{a_x k_x}{2} + \Omega_{a_y}^2 \sin^2 \frac{a_y k_y}{2}) - \Omega_{a_z}^2 - \Omega_a^2 \right] G_{0; m_l} + \\
 & + \Omega_{a_x}^2 e^{ia^a k_z} G_{1; m_l} + \Omega_a^2 e^{-iak_z} G_{n_a + n_b - 1; m_l} = \frac{i\hbar}{2\pi M_a} \delta_{0, m_l}, \quad (4.38)
 \end{aligned}$$

pri čemu su uvedene oznake:

$$\frac{C_a^{x/y/z}}{M_a} = \Omega_{a_x/y/z}^2; \quad \frac{C}{M_a} = \Omega_a^2. \quad (4.39)$$

Ponavljajući isti postupak izračunavanja za svaki sloj i uvodeći za $n_l \in (n_a, n_a + n_b - 1)$ oznake analogne onima u (4.39):

$$\frac{C_b^{x/y/z}}{M_b} = \Omega_{b_x/y/z}^2; \quad \frac{C}{M_b} = \Omega_b^2. \quad (4.40)$$

dobija se sistem od $n_a + n_b$ nehomogenih algebarsko-diferencnih jednačina, sa isto toliko nepoznatih Grinovih funkcija:

$$\begin{aligned} & \left[\omega^2 - 4\left(\Omega_{a_x}^2 \sin^2 \frac{a_x k_x}{2} + \Omega_{a_y}^2 \sin^2 \frac{a_y k_y}{2}\right) - \Omega_{a_z}^2 - \Omega_a^2 \right] G_{0;m_l} + \\ & + \Omega_{a_z}^2 e^{ia^a k_z} G_{1;m_l} + \Omega_a^2 e^{-ia^a k_z} G_{n_a+n_b-1;m_l} = \frac{i\hbar}{2\pi M_a} \delta_{0;m_l} \\ & \left[\omega^2 - 4\left(\Omega_{a_x}^2 \sin^2 \frac{a_x k_x}{2} + \Omega_{a_y}^2 \sin^2 \frac{a_y k_y}{2}\right) - 2\Omega_{a_z}^2 \right] G_{1;m_l} + \\ & + \Omega_{a_z}^2 e^{ia^a k_z} G_{2;m_l} + \Omega_a^2 e^{-ia^a k_z} G_{0;m_l} = \frac{i\hbar}{2\pi M_a} \delta_{1;m_l} \\ & \quad * \quad * \quad * \\ & \left[\omega^2 - 4\left(\Omega_{a_x}^2 \sin^2 \frac{a_x k_x}{2} + \Omega_{a_y}^2 \sin^2 \frac{a_y k_y}{2}\right) - 2\Omega_{a_z}^2 \right] G_{n_a-2;m_l} + \\ & + \Omega_{a_z}^2 e^{ia^a k_z} G_{n_a-1;m_l} + \Omega_a^2 e^{-ia^a k_z} G_{n_a-3;m_l} = \frac{i\hbar}{2\pi M_a} \delta_{n_a-2;m_l} \\ & \left[\omega^2 - 4\left(\Omega_{a_x}^2 \sin^2 \frac{a_x k_x}{2} + \Omega_{a_y}^2 \sin^2 \frac{a_y k_y}{2}\right) - \Omega_{a_z}^2 - \Omega_a^2 \right] G_{n_a-1;m_l} + \\ & + \Omega_{a_z}^2 e^{ia^a k_z} G_{n_a;m_l} + \Omega_a^2 e^{-ia^a k_z} G_{n_a-2;m_l} = \frac{i\hbar}{2\pi M_a} \delta_{n_a-1;m_l} \\ & \left[\omega^2 - 4\left(\Omega_{b_x}^2 \sin^2 \frac{a_x k_x}{2} + \Omega_{b_y}^2 \sin^2 \frac{a_y k_y}{2}\right) - \Omega_{b_z}^2 - \Omega_b^2 \right] G_{n_a;m_l} + \\ & + \Omega_{b_z}^2 e^{ia^b k_z} G_{n_a+1;m_l} + \Omega_b^2 e^{-ia^b k_z} G_{n_a-1;m_l} = \frac{i\hbar}{2\pi M_b} \delta_{n_a;m_l} \\ & \left[\omega^2 - 4\left(\Omega_{b_x}^2 \sin^2 \frac{a_x k_x}{2} + \Omega_{b_y}^2 \sin^2 \frac{a_y k_y}{2}\right) - 2\Omega_{b_z}^2 \right] G_{n_a+1;m_l} + \\ & + \Omega_{b_z}^2 e^{ia^b k_z} G_{n_a+2;m_l} + \Omega_b^2 e^{-ia^b k_z} G_{n_a;m_l} = \frac{i\hbar}{2\pi M_b} \delta_{n_a+1;m_l} \\ & \quad * \quad * \quad * \\ & \left[\omega^2 - 4\left(\Omega_{b_x}^2 \sin^2 \frac{a_x k_x}{2} + \Omega_{b_y}^2 \sin^2 \frac{a_y k_y}{2}\right) - 2\Omega_{b_z}^2 \right] G_{n_a+n_b-2;m_l} + \\ & + \Omega_{b_z}^2 e^{ia^b k_z} G_{n_a+n_b-1;m_l} + \Omega_b^2 e^{-ia^b k_z} G_{n_a+n_b-3;m_l} = \frac{i\hbar}{2\pi M_b} \delta_{n_a+n_b-2;m_l} \\ & \left[\omega^2 - 4\left(\Omega_{b_x}^2 \sin^2 \frac{a_x k_x}{2} + \Omega_{b_y}^2 \sin^2 \frac{a_y k_y}{2}\right) - \Omega_{b_z}^2 - \Omega_b^2 \right] G_{n_a+n_b-1;m_l} + \\ & + \Omega_{b_z}^2 e^{ia^b k_z} G_{0;m_l} + \Omega_b^2 e^{-ia^b k_z} G_{n_a+n_b-2;m_l} = \frac{i\hbar}{2\pi M_b} \delta_{n_a+n_b-1;m_l}. \end{aligned} \quad (4.41)$$

Ako ovaj model pojednostavimo, svodeći ga smenama:

$$\begin{aligned} a^a = a^b = \bar{a} = a = a_z : & \quad \Omega_{a_x}^2 = \Omega_{a_y}^2 = \Omega_{a_z}^2 = \alpha \Omega_a^2 : \\ a_x^{a/b} = a_y^{a/b} = a_z = a : & \quad \Omega_{b_x}^2 = \Omega_{b_y}^2 = \Omega_{b_z}^2 = \beta \Omega_b^2, \end{aligned}$$

na model proste kubne rešetke i uvedemo oznake:

$$\begin{aligned} \varrho_a &= \frac{\omega^2}{\Omega_a^2} - 4\alpha \left(\sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y}{2} \right) - 2\alpha; \\ \varrho_b &= \frac{\omega^2}{\Omega_b^2} - 4\beta \left(\sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y}{2} \right) - 2\beta, \end{aligned} \quad (4.42)$$

dobijamo sistem jednačina, čija se determinanta može napisati u sledećoj formi:

$$\left| \begin{array}{ccc|ccc|cc} \varrho_a + \alpha - 1 & \alpha e^{iak_z} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e^{-iak_z} \\ \alpha e^{-iak_z} & \varrho_a & \alpha e^{iak_z} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \alpha e^{-iak_z} & \varrho_a & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ - & - & - & - & - & - & - & - & - \\ 0 & 0 & 0 & \varrho_a + \alpha - 1 & e^{iak_z} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-iak_z} & \varrho_b + \beta - 1 & \beta e^{iak_z} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \beta e^{-iak_z} & \varrho_b & 0 & 0 & 0 \\ - & - & - & - & - & - & - & - & - \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \varrho_b & \beta e^{iak_z} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \beta e^{-iak_z} & \varrho_b & \beta e^{iak_z} \\ e^{iak_z} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \beta e^{-iak_z} & \varrho_b + \beta - 1 \end{array} \right| \cdot \mathcal{N}_{II} \quad (4.43)$$

gde je $\mathcal{N}_{II} = (n_a + n_b) \times (n_a + n_b)$.

Nepoznatih $n_a + n_b$ Grinovih funkcija određuju se formulom

$$G_{m_z} = \frac{D_{m_z}}{D},$$

gde je D_{m_z} determinanta promenljive, a D determinanta sistema. Polovi Grinovih funkcija pomoću kojih se određuje zakon disperzije fonona dobijaju se iz uslova da je determinanta sistema (4.43) jednaka nuli [12].

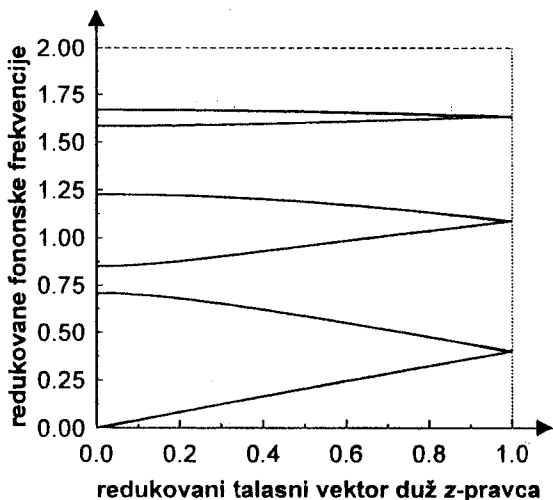
4.3 Zakon disperzije fonona

Kako je uslov $D = 0$ analitički nerešiv, ovde su izvršene numeričke analize za neke konkretne slučajeve. Posmatrane su različite kombinacije brojeva atoma n_a i n_b , kao i promena odnosa konstanti elastičnosti između i unutar filmova. Prilikom dalje analize posmatrane su superrešetke izgrađene od filmova (sa n_a odnosno n_b slojeva) iste vrste atoma i to u dva slučaja.

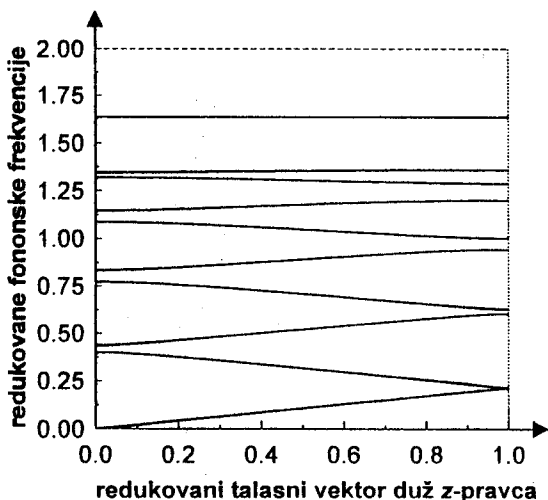
1. Kada je veza između atoma unutar slojeva slabija od veze između atoma s graničnih površina filmova ($\alpha = \beta = 0.5$).
2. Kada je veza između atoma unutar slojeva jača od veze između atoma s graničnih površina filmova ($\alpha = \beta = 1.5$).

Ova dva slučaja grafički su prikazana na slikama 4.2a-f i 4.3a-f, respektivno, pri čemu su na ordinatama predstavljene redukovane fononske frekvencije $(\omega/\Omega)^5$, a na apscisama redukovani talasni vektori duž z -pravca $\tilde{a}k_z(n_a + n_b)/\pi$. Razmatran je samo centar prve Brillouenove zone ($k_x = k_y = 0$). U zagradama su dati brojevi atoma u odgovarajućim slojevima: (n_a, n_b) .

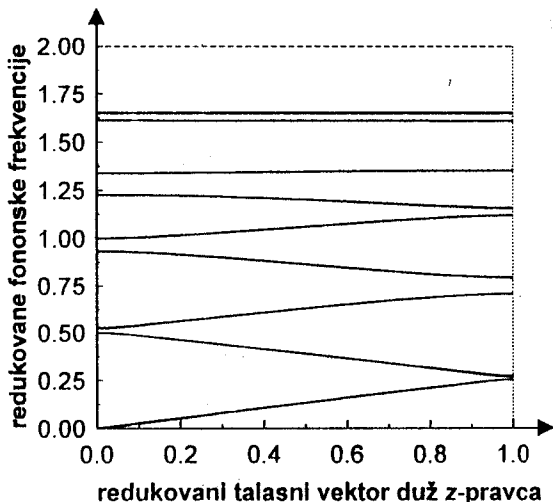
⁵Na osnovu izraza (4.39) i (4.40), frekvencije Ω_a i Ω_b povezane su relacijom: $\Omega_a^2 = \frac{M_b}{M_a} \Omega_b^2 \equiv m \Omega_b^2$. U analizi je uzeto da je $m = 1$ odakle proizilazi: $\Omega_a = \Omega_b \equiv \Omega$.



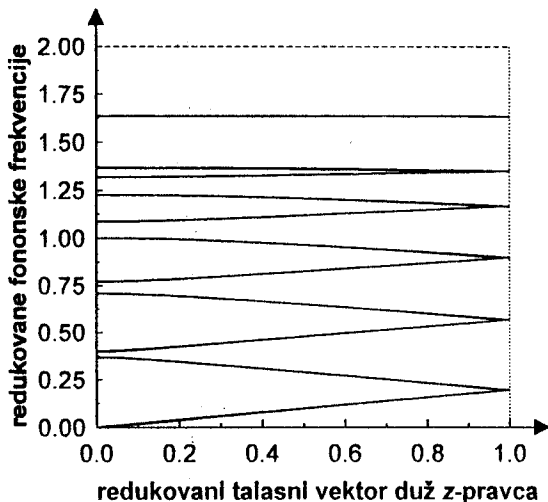
a) (3,3)



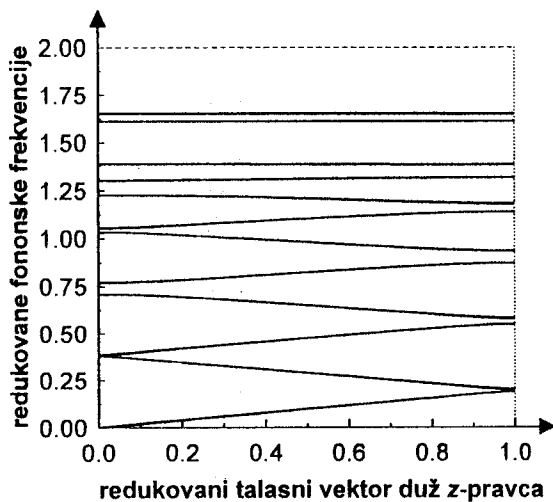
b) (6,5)



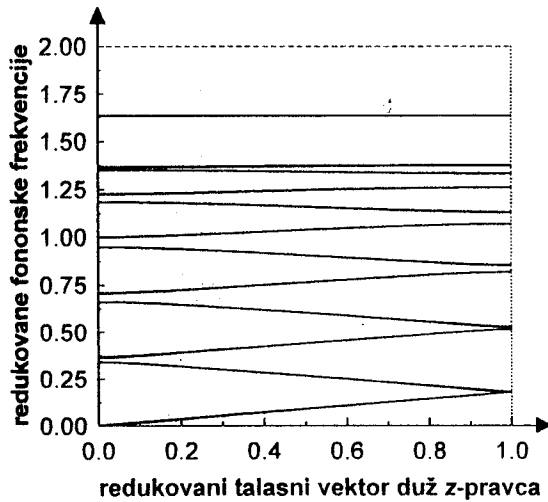
c) (6,3)



d) (6,6)

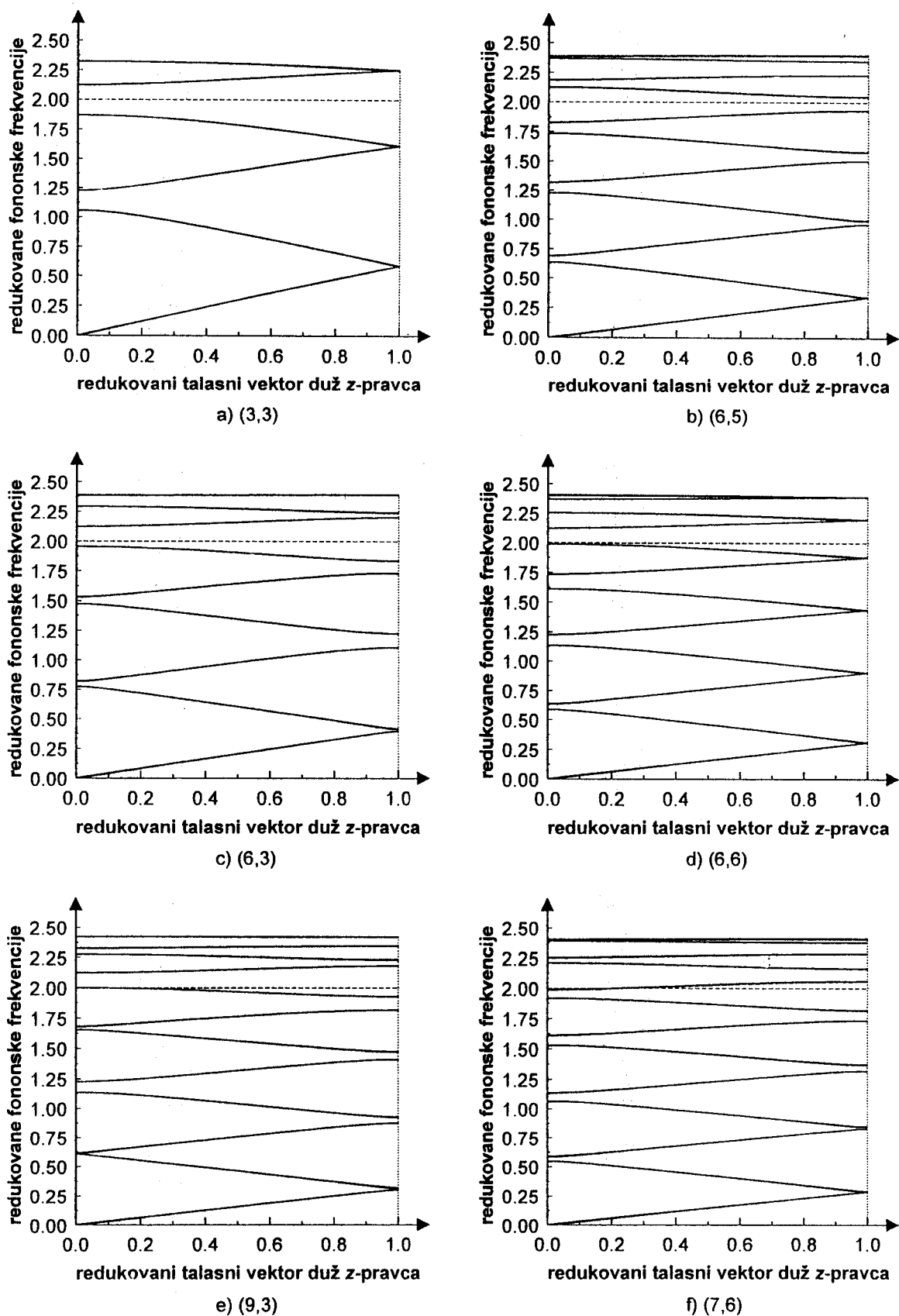


e) (9,3)



f) (7,6)

Slika 4.2: Zakon disperzije fonona za $\alpha = \beta = 0.5$



Slika 4.3: Zakon disperzije fonona za $\alpha = \beta = 1.5$

Analizom prikazanih grafika uočene su sledeće karakteristike zakona disperzije fonona u superrešetkama⁶.

- Sa porastom energije (redukovane fononske frekvencije) fononska stanja se zgušnjavaju i to za sve posmatrane vrednosti kombinacija brojeva atoma u slojevima superrešetke. kao i parametara α i β , pri čemu je pojava izraženija u slučaju jače vezanih filmova ($\alpha = \beta = 0.5$).
- U slučaju jače veze između slojeva superrešetke ($\alpha = \beta = 0.5$) dolazi do potiskivanja energetskih nivoa unutar balkovske zone ($\omega/\Omega \approx 2$) za oko 1/8 njene širine i to bez obzira na ukupan broj atoma $n_a + n_b$ unutar osnovnog motiva superrešetke. Ako je veza između slojeva slabija ($\alpha = \beta = 1.5$), energetski nivoi bivaju izbačeni iznad balkovske zone za otprilike isti iznos. Pri tome je broj disperzionih grana N izvan zone približno dat relacijama:

$$\text{- ako je } n_a + n_b \text{ parno} \Rightarrow N = \frac{n_a + n_b - 2}{2},$$

$$\text{- ako je } n_a + n_b \text{ neparno} \Rightarrow N = \frac{n_a + n_b - 3}{2}.$$

- U slučaju simetrične superrešetke ($n_a = n_b$), disperzione grane se međusobno spajaju na granici prve Brillouinove zone.
- Za iste vrednosti zbira brojeva atoma u slojevima superrešetke ($n_a + n_b$), međusobno približavanje najviših disperzionih grana je utoliko veće, ukoliko je razlika između n_a i n_b manja.
- Na osnovu sprovedenih analiza nisu uočene nikakve simetrije disperzionih grana, niti izrazitije pravilnosti u rasporedu i širini dozvoljenih, odnosno zabranjenih energetskih zona.

⁶U cilju egzaktnije analize ispitano je više od 60 različitih slučajeva, a na graficima su ovde prikazani samo najkarakterističniji.

5 Zaključak

U radu je najpre formulisan hamiltonijan opisane modelne strukture fononskog podsistema superrešetke i dobijen sistem jednačina za određivanje fononskih frekvencija, a potom su analizirani energetske spektri fonona u superrešetkama koje su izgrađene naizmeničnim ponavljanjem tankih filmova istog materijala. Istraženi su uticaji parametara superrešetke (odnos konstanti elastičnosti unutar i između slojeva filmova i broj njihovih atoma) na fononske spektre. Na osnovu ovih analiza došlo se do sledećih rezultata.

1. Kao posledica narušenja translacione invarijantnosti duž z -pravca dolazi do cepanja energetske zone (koja je kao i kod neograničenih kristala kontinualna) na podzone razdvojene zabranjenim energetskim zonama.
2. Kako je dužina motiva koji se ponavlja duž z -pravca superrešetke veća od medjuatomskih rastojanja, mora se redefinisati z -komponenta talasnog vektora fonona.
3. Sa porastom energije, fononska stanja se, u svim ispitanim slučajevima, zgušnjavaju.
4. U slučaju simetrične superrešetke ($n_a = n_b$) sa istim atomima, disperzione grane se međusobno spajaju na granici prve Brillouinove zone.
5. Za iste vrednosti zbira brojeva atoma u slojevima superrešetke ($n_a + n_b$), međusobno približavanje najviših disperzionih grana je utoliko veće, ukoliko je razlika između n_a i n_b manja.
6. U slučaju jače veze između slojeva superrešetke, dolazi do potiskivanja energetskih nivoa unutar balkovske zone za oko $1/8$ njene širine i to bez obzira na ukupan broj atoma unutar osnovnog motiva superrešetke.
7. Ako je veza između slojeva superrešetke slabija, dolazi do istiskivanja energetskih nivoa iznad balkovske zone za otprilike isti iznos.

6 Literatura

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

UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET
KLJUČNA DOKUMENTACIJSKA INFORMACIJA

- Redni broj:
RBR
- Identifikacioni broj:
IBR
- Tip dokumentacije: *Monografska dokumentacija*
TD
- Tip zapisa: *Tekstualni štampani materijal*
TZ
- Vrsta rada: *Diplomski rad*
VR
- Autor: *Dušan Ilić, br.dos. 42/87*
AU
- Mentor: *Dr Jovan Šetrajčić, redovni profesor, PMF, Novi Sad*
MN
- Naslov rada: *Fononski spektri u superrešetkama*
NR
- Jezik publikacije: *Srpski (latinica)*
JP
- Jezik izvoda: *Srpski*
JI
- Zemlja publikovanja: *Jugoslavija*
ZP
- Uže geografsko područje: *Vojvodina*
UGP
- Godina: *1999.*
GO
- Izdavač: *Autorski reprint*
IZ
- Mesto i adresa: *Prirodno-matematički fakultet, Trg D.Obradovića 4, 21000 N.Sad*
MA
- Fizički opis rada: *(6/30/12/0/6/0/0)*
FO
- Naučna oblast: *Fizika*
NO
- Naučna disciplina: *Fizika čvrstog stanja*
ND
- Predmetna odrednica / ključne reči: *kristalne superrešetke, fononi, Grinove funkcije, spektri, energetske zone*
PO
- Čuva se: *Biblioteka Instituta za fiziku, PMF, Novi Sad*
- Izvod: *U radu je primenjen metod Grinovih funkcija za ispitivanje uticaja graničnih uslova kod niza film-struktura (superrešetke) sa primitivnom ćelijom na energetski spektar i moguća stanja fonona (fononski zakon disperzije). Dobijeni rezultati predstavljeni su grafički i izvršene su analize, odnosno njihova poredjenja sa odgovarajućim rezultatima u idealnim beskonačnim strukturama. Na osnovu toga uočene su najbitnije razlike između posmatranih sistema.*
IZ
- Datum prihvatanja teme od strane Veća: *24.12.1999.*
DP
- Datum odbrane: *27.12.1999.*
DO
- Članovi komisije:
 - Predsednik:
Dr Ljiljana Mašković, redovni profesor, PMF, Novi Sad
 - Članovi:
Dr Jovan Šetrajčić, redovni profesor, PMF, Novi Sad
Dr Miodrag Krmar, docent, PMF, Novi Sad
- KO