

UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO – MATEMATIČKI FAKULTET

– DOKTORSKA DISERTACIJA –

**FONONSKE SPECIFIČNOSTI I TERMODINAMIKA
KRISTALNIH NANOSTRUKTURA**

MENTOR

AKADEMIK, PROF. DR JOVAN ŠETRAJČIĆ

KANDIDAT

DUŠAN ILIĆ

Novi Sad, 2013. godine

*Ivani, Andreju i Dariu,
na beskrajnom strpljenju i razumevanju.*

*Veliku zahvalnost na pomoći i podršci prilikom izrade ove disertacije dugujem
dvojici Akademika, prof. dr Jovanu Šetračiću, i prof. dr Miljku Satariću, kao
i mom dragom mentoru sa magistarskih studija, prof. dr. Dejanu Rakoviću.*

SADRŽAJ

1 Uvod	5
1.1 Klasifikacija nanostruktura	6
1.2 Nanofabrikacija	7
1.3 Spektroskopija i nanotehnologije	10
1.4 Nanomaterijali i njihova primena	11
1.5 Značaj i detekcija fonona	14
2 Fononi u neograničenim kristalnim strukturama	18
2.1 Hamiltonian fononskog podsistema	18
2.2 Formiranje fononskog modela	21
2.3 Zakon disperzije fonona	22
2.4 Gustina fononskih stanja	25
2.5 Fononska termodinamika	25
2.5.1 Toplotna kapacitivnost kristalne rešetke	26
2.5.2 Toplotna provodnost	31
3 Fononi u tankim kristalnim filmovima	35
3.1 Model filma	35
3.2 Jednačine kretanja	37
3.3 Spektri i stanja fonona u filmu	38
3.4 Gustina fononskih stanja	40
3.5 Termodinamika filma	42
4 Fononi u superrešetkama	46
4.1 Model superrešetke	47
4.2 Jednačine kretanja	49
4.3 Zakon disperzije fonona	53
4.4 Gustina fononskih stanja	56
4.5 Termodinamika superrešetki	57

5 Fononi u kvantnim žicama	59
5.1 Model kvantne žice	59
5.2 Jednačine kretanja	64
5.3 Spektri fonona u žici	69
5.4 Gustina fononskih stanja	72
5.5 Termodinamika kvantne žice	73
6 Fononi u kvantnim tačkama	78
6.1 Model kvantne tačke	78
6.2 Jednačine kretanja	87
6.3 Fononski spektri u kvantnoj tački	98
6.4 Gustina fononskih stanja	103
6.5 Termodinamika kvantne tačke	105
7 Zaključak	109
L i t e r a t u r a	111

1 Uvod

Nanotehnologija [1–4] je multidisciplinarna oblast zasnovana na izučavanju procesa koji se odvijaju na nanometarskoj skali¹, kao i na dizajnu, sintezi i primeni materijala nanometarskih dimenzija. Radi se, dakle, o tehnologiji koja manipuliše sa pojedinačnim atomima, malim molekulima ili sa jednim makromolekulom. Razvoj nanotehnologije započeo je kada je ustanovljeno da redukcija dimenzija u cilju konfiniranja kretanja elementarnih pobuđenja ima za posledicu potpuno izmenjene fizičke osobine posmatranog materijala u poređenju sa makroskopskim uzorkom.

Pod pojmom „*kristalne nanostrukture*” [4–9] podrazumevaju se niskodimenzionalni kristalni sistemi čije su dimenzije u jednom, dva ili sva tri kristalografska pravca manje od srednje dužine slobodnog puta nosilaca fizičkih osobina u njima (dimenzije reda veličine De Brogljeve talasne dužine). U takvim sistemima izraženi su kvantni efekti, usled čega je primena kvantomehaničkog opisa kretanja nosilaca neophodna na nivou cele strukture, a ne samo u okviru elementarne celije. Ova redukcija veličine navedenih struktura do atomske skale dimenzija dovodi do pojave bitno različitih fizičkih osobina materijala, koje se mogu kontinuirano menjati na relativno jednostavan način (npr. promenom debljine slojeva ili sastava materijala) u dosta širokom opsegu. Ove izmenjene osobine materijala posledica su sledećih nekoliko fenomena.

1. *Kvantnog konfiniranja* – konfiniranje elementarnih pobuđenja (fonona, nosilaca nanelektrisanja, eksitona itd.) na dimenzije reda veličine međuatomskih rastojanja ima za posledicu kvantizaciju energije i impulsa, kao i smanjenje gustine njihovih stanja;
2. *Kvantne koherencije* – fazna razlika talasnih funkcija nosilaca koji se kreću unutar ovakvih struktura ostaje do izvesnog stepena očuvana, tako da se efekat interferencije mora uzeti u obzir. Ipak, u nanostrukturama kvantna koherencija uopšteno govoreći nije očuvana savršeno kao što je to slučaj kod atoma i molekula, već je često u većoj ili manjoj meri poremećena strukturnim defektima. Iz tog razloga, u analizi kretanja nosilaca u ovim strukturama neophodno je uzeti u obzir i koherentne i dekoherentne efekte, što u velikoj meri usložnjava problem;
3. *Uticaja graničnih površi i međupovrši* – znatan broj (ponekad čak i većina) atoma koji sačinjavaju nanostrukturu locirana je na ili u blizini graničnih površi ili međupovrši. Mehaničke, električne, termodinamičke, magnetne, optičke i hemijske osobine ovih atoma mogu se značajno razlikovati od osobina atoma u unutrašnjosti strukture. Ovo je prouzrokovano time što su atomi na površini povezani sa manjim brojem istovrsnih susednih atoma ili molekula od onih u unutrašnjosti. Sa smanjenjem dimenzija strukture, ova razlika dobija na značaju. Primera radi [4], za gvozdenu kocku zapremine 1 cm^3 procenat površinskih u odnosu na ukupan broj atoma iznosiće svega $10^{-5}\%$. Kada se dimenzije kocke smanje na 10 nm , procenat površinskih atoma popeće se na 10% . U kocki gvožđa zapremine 1 nm^3 svaki atom će biti površinski.

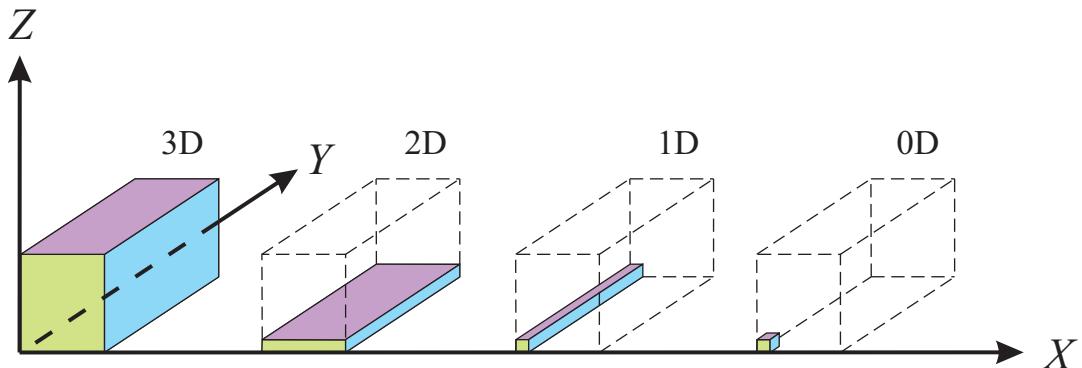
¹Jedan nanometar je milijarditi deo metra, tj. $1\text{ nm} = 10^{-9}\text{ m}$.

1.1 Klasifikacija nanostruktura

Podela nanostruktura vrši se na više načina, ali najčešće prema broju prostornih dimenzija duž kojih je kretanje nosilaca konfinirano [5]. U tom smislu razlikuju se:

1. *Kvantne jame i tanki kristalni filmovi* – to su strukture čija je debljina u jednom pravcu reda veličine nanometra, dok su dimenzije u preostala dva pravca, uslovno govoreći, beskonačne (tj. vrlo velike). Elementarna pobuđenja (elektroni, šupljine, fononi, eksitonii itd.) konfinirani su samo u jednom pravcu, dok su u preostala dva slobodni. Prema tome, u ovakvim strukturama formira se dvodimenzionalni (2D) gas elementarnih nosilaca fizičkih osobina;
2. *Kvantne žice* – kod njih su dimenzije sloja male u dva pravca, dok je dimenzija u trećem pravcu beskonačna, tako da se u kvantnoj žici formira jednodimenzionalni (1D) gas elementarnih ekscitacija;
3. *Kvantne tačke* – ovde su sve tri dimenzije male, tako da su nosioci potpuno konfinirani i formiraju nultodimenzionalni (0D) gas elementarnih pobuđenja.

Na slici 1.1 prikazana je postepena evolucija neograničene (3D) u nultodimenzionu (0D) kristalnu strukturu, dok su u tabeli 1.1 navedeni primeri sistema sa redukovanim dimenzijama.



Slika 1.1: Redukcija dimenzija kristalne strukture

2D	1D	0D
poluprovodničke kvantne jame i superrešetke silicijumski slojevi u tranzistorima sa efektom polja nanolaminatni ili kompoziciono modulisani slojevi	ugljenične nanotube i nano-filamenti metalne i magnetne nanožice poluprovodničke kvantne žice	poluprovodničke kvantne tačke fulereni koloidalne čestice

Tabela 1.1: Primeri nanostruktura

U zavisnosti od veličine udaljenja najbližih suseda razlikuju se:

1. *Višestruke kvantne jame (žice, tačke)*, kod kojih je udaljenje dovoljno veliko tako da se svaka od njih može razmatrati izolovano;
2. *Superrešetke*, kod kojih je udaljenje toliko malo da se cela struktura mora analizirati jedinstveno.

1.2 Nanofabrikacija

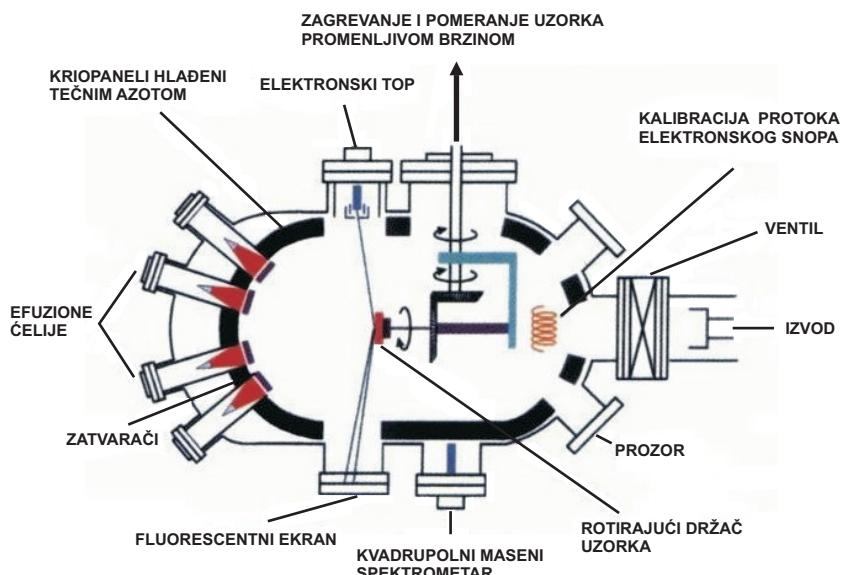
Precizno strukturiranje materijala do dimenzija reda veličine nanometra od velikog je značaja za elektroniku, optoelektroniku, visokotemperatursku superprovodnost, biologiju, medicinu, zaštitu životne sredine i brojne druge naučno-tehnološke discipline. Teorijska i eksperimentalna istraživanja osobina niskodimenzionih sistema (tankih filmova, superrešetki, kvantnih žica i kvantnih tačaka), postala su poslednjih decenija veoma intenzivna, pa bi se moglo reći da predstavljaju jedan od udarnih pravaca istraživanja u savremenoj fizici kondenzovane materije.

Razvoj sofisticiranih tehnika kontrolisanog rasta vrlo tankih slojeva bitno je uzrokovao intenzivno proučavanje nanokristalnih struktura. Jedan od osnovnih principa njihovog formiranja baziran je na procesu samoizgradnje ili samosklapanja (eng. „*self-assembly-SA*“) [10–11] koja se ubraja u tzv. „bottom-up“ tehnike, gde se atomi ili molekuli sami aranžiraju u uređene niskodimenzione strukture na osnovu međusobnih fizičko-hemijskih interakcija. Iako je samoizgradnja poznata dugi niz godina, njena upotreba u industriji je tek u povoju. Unapređeno znanje termodinamike i kinetike procesa na nanoskali, uz napredovanje karakterizacionih tehnika i kompjuterskog modelovanja, trebalo bi da dovedu do razvoja kompleksnih sistema.

Najčešće korišćene metode depozicije kristalnih slojeva i formiranja nanočestica uključuju epitaksiju molekulskim snopom, MOCVD tehnologiju, epitaksiju na vrućim zidovima, epitaksiju atomskeh slojeva i vakuumsko naparavanje [5,12–17].

Epitaksija molekulskim snopom (MBE)

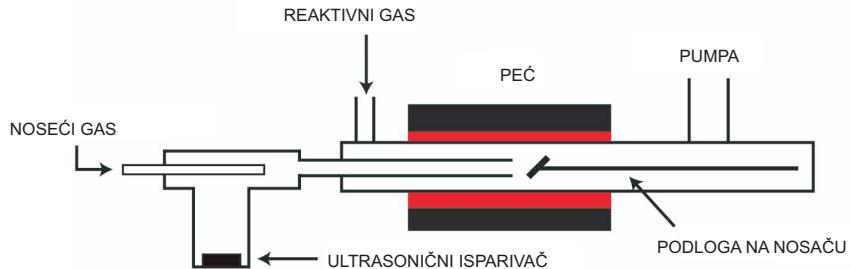
Pod **MBE** se podrazumeva proces naparavanja u uslovima vrlo visokog vakuma, koji uključuje reakciju termalnih atoma (molekula) sa monokristalnom podlogom zagrejanom do temperature koja omogućava epitaksijalni rast. Na slici 1.2 šematski je prikazan postupak MBE za epitaksiju na monokristalnu podlogu. Fluks molekula, generisan u malim Knudsenovim efuzionim čelijama, koji stiže na supstrat direktno je proporcionalan naponu pare odgovarajućeg materijala i površini otvora čelije, a obrnuto proporcionalan kvadratnom korenu iz temperature i atomske (molekulske) mase, kao i kvadratu rastojanja između efuzione čelije i podloge. Brzina rasta ima tipičnu vrednost od nekoliko monoslojeva u sekundi i jako zavisi od temperature u efuzionoj čeliji. Uz određena tehnička poboljšanja moguće je postići i brzinu rasta od oko jednog monosloja u sekundi ($1 \mu\text{m}$ na čas).



Slika 1.2: Šematski prikaz MBE uređaja

MOCVD - tehnologija

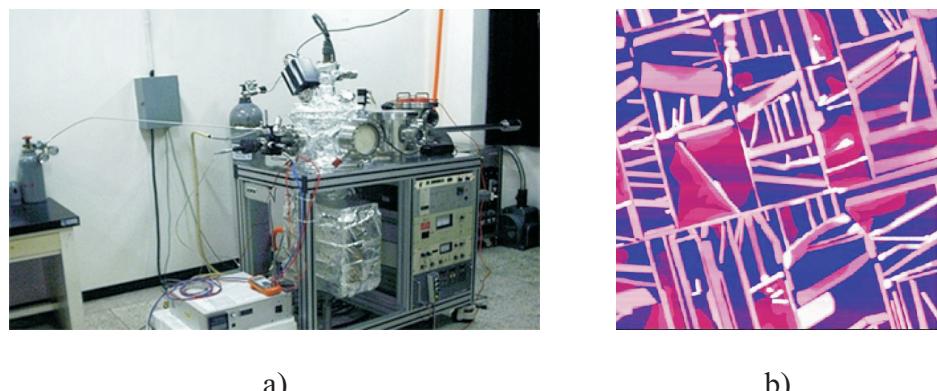
MOCVD² je proces koji se bazira na pirolizi alkila (metal-organskih jedinjenja vodonika) III grupe u atmosferi hidrida V grupe periodnog sistema elemenata. Posebno važna primena MOCVD je kod materijala koji sadrže fosfor. Šematski prikaz ove tehnologije dat je na slici 1.3.



Slika 1.3: Šematski prikaz MOCVD uređaja

Epitaksija na vrućim zidovima („Hot-wall-epitaxy”)

Ova metoda zasniva se na zagrevanju zidova zvona u kome se odigrava rast i služi za dobijanje tankih slojeva II–VI i IV–VI jedinjenja, kao i legura na bazi ovih jedinjenja. Ova tehnika je bolja od MBE jer koristi manje materijala i ne zahteva ultravisoki vakuum. Na slici 1.4a prikazan je jedan konkretni uređaj koji se koristi za epitaksiju na vrućim zidovima, dok je na slici 1.4b dat topografski prikaz visoko uređenog tankog filma načinjenog od organskog poluprovodnika para-seksifenila ($C_{36}H_{26}$) naraslog ovom metodom na podlozi od kristalnog kalijum-hlorida.

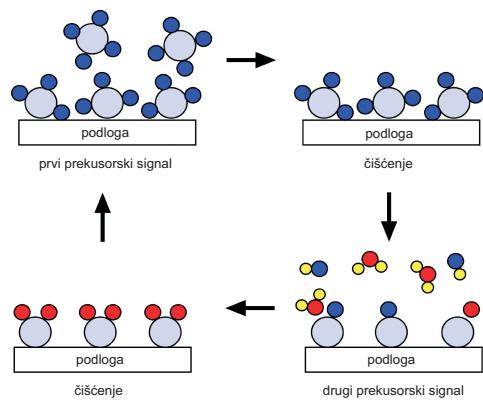


Slika 1.4: a) Aparatura za epitaksiju na vrućim zidovima ;
b) $C_{36}H_{26}$ tanki film dobijen ovom metodom

Epitaksija atomskih slojeva (ALE)

Za razliku od MBE i MOCVD kojima se mogu realizovati samo 2D strukture, upotreboom ove metode moguće je konstruisati razne oblike struktura kao što su kvantne tačke, kvantne cevi, kvantne zmije itd. Na slici 1.5 prikazan je tipičan ALE ciklus: on se sastoji od niza samoograničavajućih hemijskih reakcija (tzv „polureakcija”) između prekursora u gasovitom agregatnom stanju i podloge. Prekursor se ubacuje u reaktor sekvencialno.

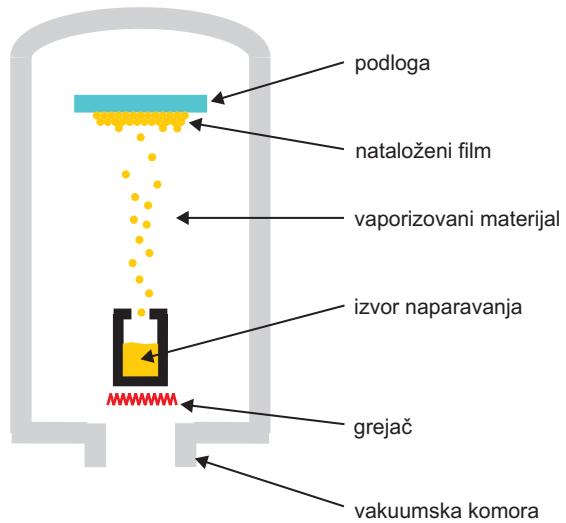
²Metalorganic chemical vapour deposition.



Slika 1.5: Šematski prikaz tipičnog ALE ciklusa

Vakuumsko naparavanje

Vakuumsko naparavanje (slika 1.6) se obično vrši u zvonastom sudu pod uslovima visokog vakuma ($1,5 \cdot 10^{-3} - 1,5 \cdot 10^{-4}$ Pa). Podloga i materijal koji se naparava postavljaju se u zvonasti sud, sistem se ispumpava i materijal se zagreva pomoću električnog elementa (užarene volframove niti) sve dok ne počne da isparava. U uslovima visokog vakuma srednji slobodni put isparenih molekula postaje uporediv sa dimenzijama zvona i vaporizovani materijal zrači u svim pravcima unutar zvona. Podloga je postavljena na izvesno rastojanje od izvora isparavanja i određena količina isparenog materijala se taloži na nju, formirajući prilično jednolik tanki film. Podloga se često zagreva kako bi se obezbedilo dobro prijanjanje nataloženog filma. Vakuumskim naparavanjem mogu se dobiti i otpornički i provodni filmovi, uključujući aluminijumske, zlatne i srebrne provodnike, odnosno nikl-hromske otpornike.



Slika 1.6: Vakuumsko naparavanje

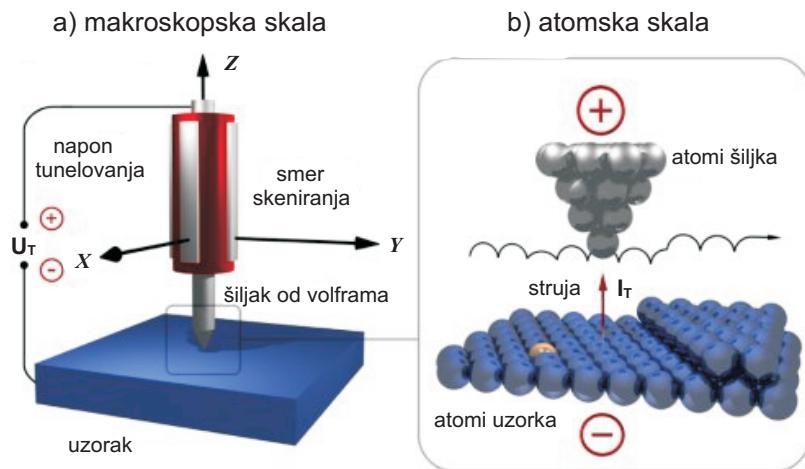
Za formiranje kvantnih žica koriste se različiti postupci: ecovanje, selektivna epitaksija, rast na zakošenom supstratu i konfiniranje mehaničkim naponom. Njena najjednostavnija forma je slobodna kvantna žica koja se dobija nagrzanjem površine materijala u poroznom silicijumu. Visina ovakvih struktura je reda veličine mikrometra, a širina reda nanometra.

Iako se istraživanja u nanotehnologiji baziraju na dobro poznatim i proverenim dostignućima fizike, hemije, nauke o materijalima i tehnike, istraživači u ovoj oblasti suočavaju se sa mnogim problemima koji su jedinstveni za nanostrukture i nanomaterijale. Na primer, dopiranje poluprovodnika je za makroskopske uzorke praktično rutinski, tj. dobro izučen postupak. Međutim, normalne slučajne fluktuacije u koncentraciji dopanata na nanometarskoj skali postaju izuzetno značajne i ne mogu se tolerisati. Sa tipičnom koncentracijom dopanata od 10^{18} m^{-3} u elementu dimenzija $10 \times 10 \times 10 \text{ nm}^3$ nalazio bi se samo jedan atom dopanta. Bilo kakva fluktuacija distribucije dopanata u ovom rasponu dimenzija rezultovala bi njegovim potpuno izmenjenim osobinama. Pored toga, nije svejedno ni na kojoj se poziciji unutar uzorka nalazi primesni atom, s obzirom da bi njegova površinska lokacija imala drugačiji uticaj nego kada bi se nalazio u unutrašnjosti uzorka. Da bi se obezbedila uspešna proizvodnja i obrada nanomaterijala i nanostruktura moraju se prevazići sledeći problemi:

1. Savladati znatnu površinsku energiju, koja je posledica izuzetne veličine površine u odnosu na zapreminu. Treba imati u vidu da su specifična površina, a samim tim i ukupna površinska energija zanemarljivi kod makroskopskih uzoraka, ali postaju značajne za vrlo male dimenzije čestica. Kada se veličina čestica promeni od santimetarskih dimenzija na nanometarske, ukupna površina i površinska energija promene se za sedam redova veličine. Zbog ovako velike ukupne površine, svi materijali nanodimenzija poseduju veliku površinsku energiju, te su termodinamički nestabilni ili metastabilni.
2. Osigurati da nanomaterijali poseduju željene dimenzije, uniformnu distribuciju atoma u svim pravcima, morfologiju, kristaličnost, hemijski sastav i mikrostrukturu.
3. Sprečiti hrapavljenje nanomaterijala i nanostruktura kroz Ostwald-ovo zrenje³ ili anglomeraciju sa protokom vremena.

1.3 Spektroskopija i nanotehnologije

Važno oruđe koje je stimulisalo istraživanja na polju nanofizike i nanotehnologije je *skenirajući tunelski mikroskop* (STM) [18], konstruisan od strane Gerda Bininga i Hajnriha Rorera, za koji su nagrađeni Nobelovom nagradom 1986. godine. Princip rada STM mikroskopa na makroskopskoj i na atomskoj skali prikazan je na slici 1.7, a zasniva se na jekujoj zavisnosti kvantnomehaničkog tunel-efekta od rastojanja.



Slika 1.7: Princip rada STM-a na: a) makroskopskoj, i b) atomskoj skali dimenzija

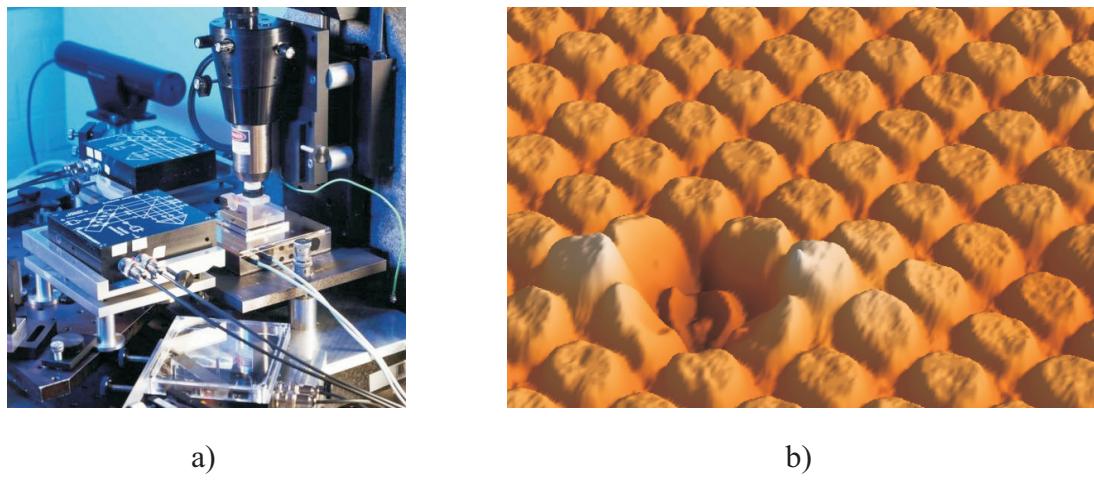
³Ostwald-ovo zrenje podrazumeva situaciju pri kojoj dve pojedinačne nanostrukture prerastaju u jednu, pri čemu veća od njih raste na račun manje, sve dok je potpuno ne apsorbuje.

Tanki metalni šiljak postavi se u neposrednu blizinu ispitivane površine. Pri rastojanjima od samo nekoliko angstrema, preklapanje šiljka i elektronskih talasnih funkcija uzorka je dovoljno veliko da se javi struja tunelovanja:

$$I_T \sim e^{-2kd},$$

gde je d – rastojanje između šiljka i uzorka, a $k = \sqrt{2m(eU - E)}/h$ – konstanta koja zavisi od visine potencijalne barijere. Kod metala sa izlaznim radom od oko (4 – 5) eV ova konstanta je reda veličine $0,1 \text{ nm}^{-1}$. Na taj način, povećanje rastojanja između šiljka i ispitivane površine od samo $0,1 \text{ nm}$ menja jačinu struje tunelovanja za otprilike red veličine. Ukoliko se pomoću elektronske povratne sprege jačina struje tunelovanja održava konstantnom, vrh šiljka prati konturu konstantne lokalne gustine stanja i pruža informacije o topografiji površine uzorka.

Tokom prethodne dve decenije STM je inspirisao nastanak velikog broja srodnih skanirajućih mikroskopskih istraživačkih instrumenata, koji mere mnoštvo osobina sa atomskom rezolucijom. Daleko najvažniji takav uređaj je *mikroskop međuatomskih sila* (AFM) [19], koji omogućava ispitivanja slabo provodnih površi i korišćen je za istraživanje takvih problema kao što su sile neophodne za razgradnju pojedinačnih proteinskih molekula. Dok kod STM vrh sonde ne dodiruje površinu nego se rastojanje između površine i šiljka ostvaruje putem kontrole struje tunelovanja elektrona, kod AFM vrh interaguje sa površinom uzorka. S obzirom da sile ove interakcije ne zavisi od električne provodnosti ispitivanog uzorka, pomoću mikroskopa međuatomskih sila se mogu ispitivati i neprovodni uzorci. Na slici 1.8a prikazan je AFM Državne laboratorije za fiziku (Teddington, Velika Britanija)⁴, dok se na slici 1.8b vidi snimak PdFePd tankog filma širine 800 nm i debljine 10 nm, dobijen uz pomoć ovog instrumenta⁵.



Slika 1.8: a) *Mikroskop međuatomskih sila*; b) *Snimak površine PdFePd tankog filma*

Potonji primer takođe ilustruje jedan značajan aspekt navedenih uređaja: osim toga što prikazuju atome sa površine čvrstih tela, njima je moguće uticati na pojedinačne atome i molekule. Don Ajgler i njegovi saradnici [20] pružili su veoma atraktivne primere mogućnosti da se atomi postave u unapred definisane položaje na površi.

1.4 Nanomaterijali i njihova primena

Niskodimenzione strukture, koje su predmet ove disertacije, imaju izuzetan značaj za nove tehnologije sa potencijalom primena u nanoelektronici, optoelektronici, visokotemperaturskoj superprovodnosti, katalizi, biologiji, farmaciji i medicini [21–25].

⁴Preuzeto sa sajta <http://www.npl.co.uk/metrological-afm>

⁵Preuzeto sa sajta <http://material.fysik.uu.se/Research/Methods/Atomicprobes.html>

Elektronika

Istraživanja nanostruktura podstaknuta su tekućom minijaturizacijom u mikroelektronskoj industriji [21]. Dok je originalni kontaktni tranzistor, koji su 1947. godine konstruisali Bardin, Bratin i Šokli, bio veličine nekoliko centimetara, danas se prave elektronski uređaji bazirani na jednoj zlatnoj nanočestici koja premošćuje dva molekulska monosloja. Trenutne veličine komponenata fabrički izrađivanih integrisanih kola iznose oko 110 nm („Pentium IV” čip), sa perspektivom da u skorijoj budućnosti ova vrednost bude smanjena na 30 nm, što približno odgovara dimenzijama niza sastavljenog od tridesetak atoma. Da bi se ovaj cilj mogao ostvariti neophodno je savladati nekoliko velikih izazova, kao što je npr. problem stabilnosti niskodimenzionih struktura pri sobnim temperaturama na duže vreme. Značaj teorijskih istraživanja sastoji se u izučavanju i razumevanju do kojih modifikacija makroskopskih fizičkih veličina i osobina materijala može doći pri daljoj redukciji dimenzija strukture, kao i u otkrivanju potpuno novih zakonitosti koje mogu biti praktično iskorišćene.

Visokotemperaturska superprovodnost

Pošto fononi – kao što će u daljem tekstu biti pokazano – u niskodimenzionim strukturama, zbog prisustva graničnih uslova, ne mogu biti akustičkog tipa, energija pobuđenja sopstvenih oscilacija iznosi oko 40% Debajeve energije. To neposredno ukazuje na mogućnost porasta superprovodne kritične temperature do reda (60 – 70) K, sa daljim perspektivama podizanja njene vrednosti ka sobnoj temperaturi [22].

Biologija

Suštinska povezanost biologije sa nanotehnologijom [23,24] proistiće iz činjenice da najmanji oblici života – bakterije, ćelije i aktivne komponente bioloških živih organizama imaju dimenzijske veličine nanometra. Naše trenutno razumevanje procesa koji se odvijaju u biološkim organizmima na molekulskom nivou tretira molekularnu biologiju kao „živi dokaz za nanotehnologiju”. U takvoj slici DNK bi se mogla poistovetiti sa „samoreplikirajućom mašinom atomskog nivoa”, repliciranom pomoću RNK. Specifični molekuli se „samosakupljaju (*self-assembly*)” uz pomoć enzima, a ćelije se snabdevaju delovanjem „molekulskega motora” (na primer, kinezina ili dineina). Jonski kanali koji propuštaju (ili blokiraju) ulazak specifičnih jona (npr. kalijuma ili kalcijuma) u ćeliju kroz njen lipidni zid, izgledaju kao izvanredno konstruisane naprave molekulskog nivoa kod kojih specifična konformacija proteinskih molekula definiše otvoren, odnosno zatvoren kanal. Razumevanje uloge nanofizike baštinjene u molekulskim temeljima prirode može ukazati na dizajn veštački napravljenih senzora, motora i drugih naprava, pri očekivanom napretku u eksperimentalnim i inženjerskim nanotehnološkim postupcima i metodama.

Osim svega gore navedenog, važno je spomenuti i da se biološko obeležavanje neuporedivo efikasnije izvodi uz pomoć nanostruktura (pogotovo CdSe kvantnih tačaka) nego sa klasičnim organskim fluorescentnim molekulima ili radioaktivnim izvorima. Razlog tome leži u činjenici da kvantne tačke imaju veoma uzak emisioni spektar (~ 30 nm) i da – usled kvantnog konfiniranja – boja (talasna dužina) koju kvantna tačka emituje zavisi od njene veličine.

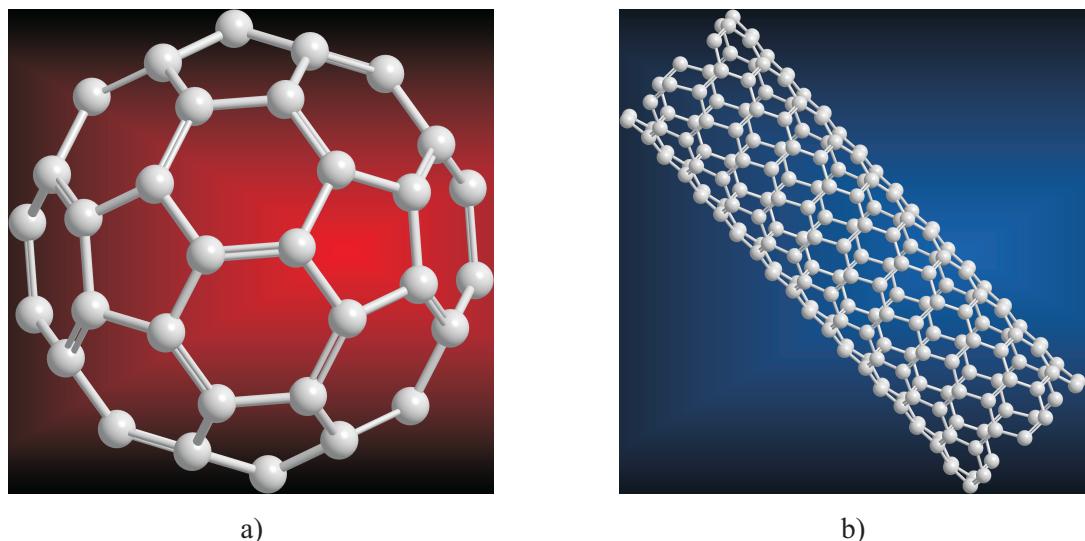
Medicina

Veštačke nanostrukture (nanočestice i nanonaprave) koje su istih veličina kao i biološki entiteti, mogu kontrolisano interagovati sa biomolekulima kako na površini, tako i u unutrašnjosti ćelije. U tom kontekstu primena nanotehnologija u zdravstvu dovila je već do formiranja izvanredno perspektivne oblasti – nanomedicine [25], koju čine tri međusobno povezana pravca:

- nanodijagnostika;
- regenerativna medicina;
- ciljana dostava lekova.

Nanodijagnostika ima za cilj identifikovanje bolesti u najranijoj fazi, u idealnom slučaju na nivou jedne ćelije. Nanotehnologija može da ponudi dijagnostičke alate bolje senzitivnosti, specifičnosti i pouzdanosti. *Regenerativna medicina* je fokusirana na mehanizme vlastitog oporavka tela u preventivi i lečenju hroničnih bolesti (npr. dijabetesa, osteoartritisa) i pomoći žrtvama povreda. Zahvaljujući nanotehnologiji ustanovljena je ćelijska i molekulska osnova za razvoj novih terapija modifikovanja bolesti za „*in situ*“ regeneraciju tkiva i oporavak, uz minimalno invazivnu hirurgiju. Svrha *ciljane dostave lekova* je razvoj novih tehnika dostave lekova radi efikasnijeg transporta leka na mesto bolesti, poboljšane reakcije pacijenata, smanjenje cene zdravstvene nege, ali i zbog identifikovanja novih načina dostave onih klasa medikamenata koji ne mogu biti efikasno dostavljeni konvencionalnim metodama. Kada se leku da oblik nanočestica, on se može dopremiti na željeno mesto, otpustiti na kontrolisan način i zaštитiti od prerane degradacije, što rezultira većom efikasnošću i drastično smanjuje neželjene sporedne efekte.

Istraživanja u nanotehnologiji nisu ograničena samo na minijaturizaciju različitih naprava, već i na sintezu novih materijala na nanometarskoj skali koja mogu ispoljavati izvanredna fizička svojstva [26–27]. Početak primene nanotehnoloških rešenja u oblasti materijala datira od 1985. godine, kada je istraživački tim koji su sačinjavali Kroto, Kerl i Smoli sa svojim doktorantima Hitom i O’Brajenom potpuno slučajno dobio prvi nanomaterijal, danas poznati molekul fuleren (C_{60}) (slika 1.9a).



Slika 1.9: a) Fuleren (C_{60}) ; b) Nanotuba

Fuleren je treća alotropska modifikacija ugljenika i sastoji se od 60 sp^2 -hibridizovanih ugljenikovih atoma, koji su spojeni u tridesetostranični eikozaedarski molekul sastavljen od 12 petočlanih (pentagoni) i 20 šestočlanih (heksagoni) prstenova, spojenih u sferni oblik C_{60} („*buckminster fullerene*“) nalik fudbalskoj lopti. Broj pentagona je uvek konstantan u sfernim molekulima ugljeničnih klastera, dok broj heksagona može biti varijabilan. Fuleren gradi kristalnu formu koja po svojoj simetričnosti spada u najviši rang uređenosti. Kao individualni molekul, C_{60} čvršći je od dijamanta, međutim, kada kristališe, kristalna rešetka mu je meka skoro kao kod grafita. Fuleren pokazuje niz interesantnih osobina kao što su fazne transformacije, električna

provodljivost i superprovodljivost kada se dopira alkalnim metalima⁶, zatim fotoprovodljivost, feromagnetizam itd. Osobine ugljenika C₆₀ su posledica karakterističnog strukturnog razmeštaja ugljenikovih atoma unutar njegove molekularne kristalne rešetke.

Japanski istraživač Idžima je 1991. godine otkrio nanotube na bazi ugljenika (slika 1.9b), koje se pokazuju kao jedan od najperspektivnijih nanomaterijala s obzirom da poseduje dobre mehaničke i električne osobine. Ugljenične nanotube su alotropska modifikacija ugljenika sa cilindričnim nanostrukturama čiji je prečnik obično oko 1nm, dok im dužina može biti i mnogo miliona puta veća. Ovi cilindrični molekuli ugljenika imaju neobične osobine, koje su od velikog značaja za nanotehnologiju, elektroniku, optiku i druge grane nauke o materijalima. Specijalno, zahvaljujući svojoj izuzetnoj toplotnoj provodljivosti i mehaničkim i električnim osobinama (mala specifična težina a velika mehanička čvrstoća), ugljenične nanotube pronalaze primenu kao aditivi različitim strukturalnim materijalima.

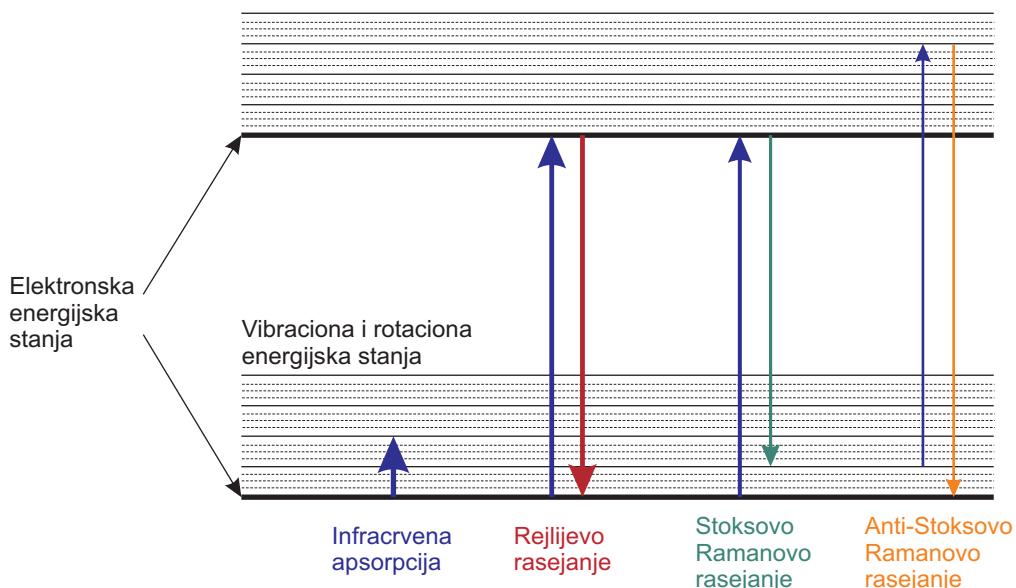
U domenu zaštite od UV zračenja nanočestice na bazi ZnO i TiO₂ pokazale su izrazite prednosti. Generalno, nanočestice obezbeđuju i do deset puta bolju hemijsku reakciju nego klasični materijali, jer se povećava aktivna površina na kojima se odigrava hemijska reakcija. Od nanotuba se prave prvi elektronski prekidači i sklopovi za potrebe nanoelektronike, a u mašinstvu užad čija je zatezna čvrstoća 8 – 10 puta veća nego kod proizvoda od istog materijala i istih dimenzija. Prava revolucija na pomolu je i u tekstilnoj industriji, jer se radi na razvoju tekstilnih vlakana koja će biti biokompatibilna i komplementarna sa kožom, a koja će pored standardne funkcije koju imaju odevni predmeti imati i ulogu biosenzornog sistema. S obzirom da se na koži u tzv. „triger“ zonama reprezentuju funkcije pojedinih organa tela, to će se u budućnosti moći napraviti „inteligentna odeća“ koja će izveštavati nosioca ili lekara o zdravstvenom stanju osobe.

1.5 Značaj i detekcija fonona

Tema ove disertacije skoncentrisana je na ispitivanje mikroskopskih i makroskopskih (termodinamičkih) osobina tankoslojnih (ultrataški filmovi i superrešetke) i niskodimenzionih (kvantne žice i tačke) kristalnih sistema i uspostavljanje korelacije između nano-dimenzija ovih struktura i kvantnih efekata koji se u njima javljaju na makroskopskom nivou. U disertaciji će posebna pažnja biti poklonjena fononskom udelu u termičkom transportu kroz niskodimenzione sisteme. Fononi predstavljaju osnovna pobuđenja u kristalima [28–36] 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, eksitonii, magnoni, plazmoni, polaroni ili neki drugi vidovi elementarnih ekscitacija. Značaj fonona ogleda se u tome što oni učestvuju u specifičnoj topoti i termičkoj provodljivosti kristala, a takođe su važne njihove interakcije sa drugim energijskim ekscitacijama (rasejanje elektrona na fononima uzrok je pojavi električnog otpora, a rasejanje fonona – bez obzira na uzrok – ograničava topotnu provodljivost; takođe, fonon-fononske interakcije povezane su sa termičkom ekspanzijom kristala). Iz svih navedenih razloga, ispitivanje udela i uticaja fononskog podsistema na fizičke karakteristike materijala poseduje veliki značaj za teoriju čvrstog stanja. Postavlja se, međutim, pitanje da li je ispravno posmatrati fononski podsistem u kristalima izolovano od svih ostalih elementarnih ekscitacija. Ova aproksimacija je očigledno ispravna u slučaju izolatora, ali se njena opravdanost može dovesti u pitanje kod metalnih uzoraka. Teorijska podloga ispravnosti primjenjenog metoda formulisana je tzv. Born-Openhajmerovom (adijabatskom) aproksimacijom, u koju se elektron-fononska interakcija može naknadno uvrstiti, često uz pomoć teorije perturbacija.

⁶C₆₀ dopiran cezijumom i rubidijumom postaje superprovodan na 33K, što je do najviša do sada ostvarena kritična temperatura za jedan molekularni superprovodnik.

Postavljeni cilj disertacije je teorijsko istraživanje mikroskopskih i makroskopskih osobina tankoslojnih i niskodimenzionih kristalnih struktura u okviru modela fonona akustičkog tipa. Metodi teorijskih istraživanja, koji tumače mehanizme i obrasce ponašanja mikroskopskih sistema i njihove reperkusije na makroskopske osobine uzoraka, do nedavno su bili primenljivi samo na idealne prostorno-vremenski translaciono invarijantne kristalne strukture. Razvoj matematičke nauke (posebno diskretne matematike) i softversko-računarske tehnike omogućio je „prilagođavanje“ pomenutih metoda istraživanja na realnije fizičke (u ovom slučaju kristalne) sisteme [37–42]. Da bi se teorijski metod i njegovi rezultati mogli verifikovati i oceniti kao ispravni i tačni, neophodno je izvršiti njihovu eksperimentalnu potvrdu. Jedan od najjednostavnijih i najpouzdanijih eksperimentalnih metoda za karakterizaciju i ispitivanje fononskih spektara u nanostrukturama jeste Ramanovo rasejanje [43–45], koje predstavlja jednu od najčešće korišćenih spektroskopskih metoda.

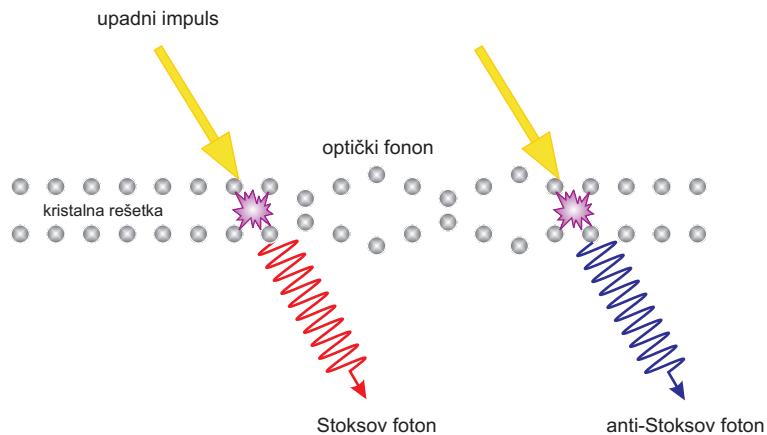


Slika 1.10: Osnovne spektroskopske metode

Spektroskopske metode omogućavaju određivanje položaja energijskih nivoa različitih ekscitacija (elektronskih, vibracionih, rotacionih ili njihovih kombinacija) u ispitivanom uzorku. Svi fenomeni koji se razmatraju u spektroskopiji objašnjavaju se pomoću nekoliko mogućih pojava interakcije elektromagnetskog zračenja i materije (slika 1.10).

1. *Apsorpcija zračenja* – sistem apsorbuje foton, nakon čega ostaje u pobuđenom stanju;
2. *Emisija zračenja (spontana ili stimulisana)* – sistem koji se nalazi u pobuđenom stanju vraća se u osnovno stanje ili pobuđeno stanje niže energije emisijom fotona;
3. *Rejljevo rasejanje* – foton koji se rasejao na ovaj način ima istu energiju kao i upadni foton, ali mu je pravac različit. Sistem ne menja svoju energiju, što podrazumeva da se radi o elastičnom rasejanju;
4. *Ramanovo rasejanje* – foton koji napušta sistem nema istu energiju kao i upadni foton, tj. Ramanovim rasejanjem sistem dobija ili gubi energiju. Razlika u energiji sistema pre i posle Ramanovog rasejanja odgovara razlici energija dolazećeg i odlazećeg fotona. Ukoliko odlazeći foton ima nižu energiju od dolazećeg fotona (sistem je rasejanjem dobio energiju), radi se o Stoksovom rasejanju, dok je u suprotnom slučaju reč o anti-Stoksovom rasejanju. Ramanovo rasejanje se može shvatiti kao optički analog Komptonovom rasejanju.

Nelinearni odziv transparentnog optičkog medijuma na intenzitet svetlosti koja kroz njega prolazi je veoma brz, ali ne i trenutan. Ova odložena reakcija optički prozirnog medijuma izazvana je vibracijama kristalne rešetke. Kada su ove vibracije povezane sa optičkim fononima, efekat se naziva *Ramanovo rasejanje*, dok su akustički fononi povezani sa *Briluenovim rasejanjem*. Kada se, na primer, dva laserska snopa sa različitim talasnim dužinama (i obično sa istim pravcem polarizacije) kreću zajedno kroz Raman-aktivni medijum, snop sa većom talasnom dužinom (tzv. Stoksov talas) može pretrpeti optičko pojačanje na račun snopa sa manjom talasnom dužinom (slika 1.11). Pri procesu Ramanovog rasejanja jedan upadni foton se transformiše u foton niže energije, a razliku u energijama upadnog i izlaznog fotona odnosi foton (kvant energije oscilacija kristalne rešetke). Principijelno je takođe moguće da već postojeći foton interaguje sa upadnim fotonom dajući jedan foton sa višom energijom koji pripada anti-Stoksovom talasu sa kraćom talasnom dužinom. Ovaj proces je, međutim, obično slab, pogotovo na nižim temperaturama. Treba, ipak, imati na umu da snažna anti-Stoksova svetlost može takođe nastati mešanjem četiri talasa ako je taj proces fazno usklađen.



Slika 1.11: Šematski prikaz procesa Ramanovog rasejanja

Zajedno sa drugim vidovima neelastičnog rasejanja svetlosti, Ramanovo rasejanje je najpouzdaniji i najčešće korišćeni metod u fizici čvrstog stanja za ispitivanje elementarnih eksitacija (pre svega fonona, ali takođe i magnona, eksitona i drugih elementarnih eksitacija), kao i za izučavanje elektronske strukture materijala. Među najvažnije teme fizike poluprovodnika koje se izučavaju metodama neelastičnog rasejanja svetlosti svakako spadaju oscilacije kristalne rešetke i niskoenergijske elektronske eksitacije. Razumevanje ovih fenomena u elementarnim poluprovodnicima i poluprovodničkim jedinjenjima, kao i u veštackim kristalima dobijenim epitaksijom molekulskim snopom i drugim tehnikama rasta veoma je značajno kako sa fundamentalnog, tako i sa praktičnog stanovišta. Kontrolisano pripremanje nanostruktura kakve su superrešetke i kvantne jame, pri trenutno ostvarivoj pouzdanosti reda veličine dela monoatomskog sloja za separaciju različitih materijala, omogućava kontrolisanje i izmenu fizičkih parametara kao što su širina elektronskog gепа, efektivne mase, dielektrične ili magnetne osobine. Sa jedne strane, ovo pruža mogućnost sistematskog ispitivanja fizičkih pojava koje potiču od promene dimenzionalnosti, dok sa druge strane – osobine naprava mogu biti optimizovane i podešavane na ovaj način. Poznavanje zakona dinamike kristalne rešetke znatno doprinosi našem razumevanju strukture kristala. Fononske frekvencije, intenziteti rasejanja i selekciona pravila koji mogu biti određeni Ramanovom spektroskopijom dovode do zaključaka koji se odnose na mikroskopske parametre kao što su vrste veza i kristalna struktura, ali i stepen odstupanja od idealne kristalne rešetke. Ove osobine takođe omogućavaju ispitivanje uticaja spoljašnjih parametara i – samim tim – sprovođenje temeljnih testova teorijskih modela čime se oni mogu dodatno poboljšati.

Osnovni nedostatak Ramanovog rasejanja je veoma mali efikasni presek za rasejanje, koji je 12 – 14 redova veličine niži od onog kod fluorescencije. Drugim rečima, na svakih 10^{12} fotona upadnog zračenja samo jedan pretrpi Ramanovo rasejanje. To znači da Ramanovo rasejanje ne proizvodi jak signal pogotovo u situacijama kada je koncentracija atoma mete veoma niska.

Analiza fononskih spektara u ultratankim filmovima, superrešetkama, kvantnim žicama i kvantnim tačkama izvršena je na bazi metoda dvovremenskih temperaturskih retardovanih Grinovih funkcija [42,46–50], koje omogućavaju izračunavanje merljivih termodinamičkih i transportnih osobina posmatranjem kako sistem reaguje na jednostavne perturbacije. 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 linearog 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 su, međutim, izuzeti 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, hamiltonijani fononskog podsistema navedenih tankslojnih i niskodimenzionalnih kristalnih struktura upravo su 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 nanostrukturama, moraju se prethodno spomenuti te iste karakteristike u neograničenim kristalnim strukturama (što je učinjeno u glavi 2 ove disertacije) i na osnovu toga izvršiti poređenje relevantnih fizičkih osobina ovih struktura. Istraživanja su podrazumevala izvođenje zakona disperzije fonona, izračunavanje gustine fononskih stanja, redefinisanje Debajevih parametara i određivanje toplotne kapacitivnosti prema Debajevom modelu i to u visokotemperaturskoj i niskotemperaturskoj aproksimaciji. U glavama 3. i 4. ova metodologija je primenjena na sisteme sa narušenom translacionom simetrijom – tanke kristalne filmove i superrešetke, pri čemu je posebna pažnja posvećena uticaju graničnih uslova na spektre i stanja fonona u njima, kao i posledicama tog uticaja na makroskopske termodinamičke procese. U glavi 5. ista razmatranja primenjena su na kvantne žice, a u glavi 6. na kvantne tačke.

2 Fononi u neograničenim kristalnim strukturama

Najjednostavniji oblik kretanja u čvrstom telu jeste oscilatorno kretanje konstituenata od kojih je sastavljena kristalna rešetka (atoma, molekula, odnosno jona) oko odgovarajućih položaja ravnoteže [35,51–64]. 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 elektromagnetskih talasa: naime, slično kao što elektromagnetno polje vrši razmenu energije sa drugim sistemima u nedeljivim elementarnim iznosima $\hbar w$ (tj. fotonima), energija vibracije kristalne rešetke takođe je kvantovana, pri čemu se kvant energije elastičnog talasa naziva *fononom*. S obzirom da nikakav eksperiment direktno analagan fotoelektričnom efektu – koji predstavlja jak dokaz u prilog kvantovanja svetlosti – nije do danas izведен sa fononima, postavlja se pitanje eksperimentalne potvrde njihovog postojanja. Najvažniji dokazi uključuju sledeće [35,54].

1. Udeo rešetke u topotnom kapacitetu čvrstog tela uvek teži nultoj vrednosti kada temperatura teži nuli. Ovo može biti objašnjeno jedino kvantovanjem vibracija kristalne rešetke.
2. U rasponu od provodnika do izolatora, specifična električna provodnost opada i za dvadesetak redova veličine, a topotna za svega dva do tri. To implicira postojanje nekakvog mehanizma prenosa topotne energije i u uslovima kada je broj slobodnih elektrona veoma limitiran (npr. kod izolatora).
3. Najubedljiviju eksperimentalnu potvrdu postojanja fonona pruža nam vibraciona spektroskopija, veoma osetljiva metoda za ispitivanje atomske strukture materijala i hemijskih veza. Vibracione frekvencije se sa velikom tačnošću mere pomoću infracrvene i Ramanove spektroskopije: X-zraci 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 kvantomehaničkih analiza linearног oscilatora, čija je energija:

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

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

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

Energija fonona zavisi od mase oscilatora M i konstante koja karakteriše elastičnu silu oscilatora C , tj. $\Omega = \sqrt{C/M}$, a impuls mu je jednak $\vec{p} = \hbar \vec{k}$.

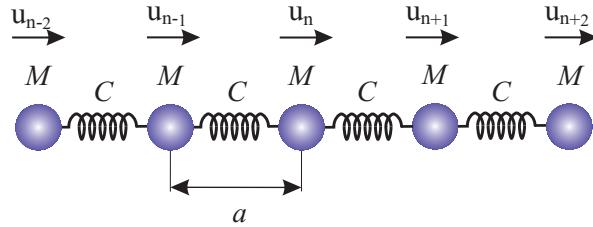
2.1 Hamiltonian fononskog podsistema

Niz atoma iste mase, na jednakim međusobnim rastojanjima (u položaju ravnoteže), koji vrše male oscilacije oko svojih ravnotežnih položaja duž linije po kojoj su raspoređeni, predstavlja jednodimenzionalni model kristala. Iako takvih kristala nema u prirodi, razmatranje ovog modela omogućava da se shvati priroda kretanja u realnim kristalima.

Hamiltonijan fononskog podsistema za najjednostavniji monoatomni kristal (slika 2.1) je oblika:

$$H = \sum_{\vec{n}} H_{\vec{n}} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}, \vec{m}} V(\vec{n} - \vec{m}) , \quad (2.2)$$

gde je $H_{\vec{n}}$ hamiltonijan izolovanog atoma na mestu \vec{n} u kristalu, a $V(\vec{n} - \vec{m})$ potencijal interakcije između dva atoma na mestima \vec{n} i \vec{m} ($V(\vec{n} - \vec{m}) = V(\vec{m} - \vec{n})$). Isti oblik ima i hamiltonijan trodimenzionog kristala proste kubne strukture ($a_x = a_y = a_z \equiv a$).



Slika 2.1: Jednodimenzioni niz istovrsnih atoma

Atomi ovakve kristalne rešetke osciluju oko svojih ravnotežnih položaja zbog elastičnih sila kojima na svaki atom (molekul) deluju ostali atomi, pa se kristal može tretirati kao sistem povezanih oscilatora. Oscilovanje jednog atoma se pomoću elastičnih međuatomske veza prenosi na susedne atome, čime se formira mehanički talas čija energija može imati samo diskretne vrednosti. Zbog međusobne povezanosti, jedan atom trpi uticaj svih ostalih atoma koji ga okružuju i istovremeno i sam utiče na njihovo oscilovanje, tako da svaki kvant nosi pečat celokupnog kolektiva atoma. Stoga se u kristalu ne može govoriti o fononima kao pobuđenjima individualnih atoma, već o fononima koji predstavljaju kvante oscilovanja kristala kao celine. Sve moguće oscilacije međusobno spregnutih atoma mogu se predstaviti kao skup interagujуćih elastičnih talasa različitih talasnih dužina (frekvencija, tj. energija) koji se prostiru u celoj zapremini kristala. Pošto su dimenzije kristala ograničene, na datoј temperaturi će se uspostaviti stanje stacionarnih oscilacija koje predstavlja superpoziciju harmonijskih ravnih talasa (stojeći talasi).

Potencijalna energija kristala na apsolutnoj nuli, kada su atomi „zamrznuti” u svojim ravnotežnim položajima data je izrazom [32–36,57–61]:

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

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

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

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, funkcija V se – primenom standardne teorije malih oscilacija – razvija u stepeni red po Dekartovim komponentama $u_\alpha(\vec{n})$ vektora $\vec{u}(\vec{n})$ oko položaja ravnoteže:

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

pri čemu α i β označavaju moguće projekcije vektora na ose Dekartovog sistema. Pošto se svi atomi, pre nego što počnu da osciluju, nalaze u ravnotežnim položajima koji odgovaraju minimumu međuatomske energije interakcije, pri razvijanju potencijalne energije u red po pomerajima parcijalni izvodi

$$\left(\frac{\partial V_{\vec{\ell}}}{\partial u_{\vec{\ell}}^\alpha} \right)_{u_{\vec{\ell}}^\alpha = 0} ; \alpha \in \{x, y, z\} ; \vec{\ell} = \vec{n} - \vec{m}$$

jednaki su nuli (uslov ravnoteže), pa se u razvoju, kao prvi različiti od nule, pojavljuju članovi koji sadrže druge izvode energije međuatomske interakcije po projekcijama. Ovi članovi predstavljaju Hukove konstante elastičnosti:

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

Dalji članovi u razvoju se odbacuju jer su srazmerni proizvodu tri i više malih atomske pomeraja. Dakle, oscilovanje karakteriše samo treći sabirak u izrazu (2.4), tzv. 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*:

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

Pošto sile koje deluju između atoma u kristalu brzo opadaju sa porastom njihovog međusobnog rastojanja $|\vec{n} - \vec{m}|$, izraz za potencijalnu energiju u jednačini (2.5) može se napisati u *aproximaciji najблиžih 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 vektora $\vec{\lambda}$ za sve najbliže susede isti (idealni kristal!), koeficijent $C_{\alpha\beta}(\vec{\lambda})$ ne zavisi od $\vec{\lambda}$. Na taj način oscilatorni hamiltonijan sistema (2.5) postaje:

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

Iz analize oscilatornog kretanja atoma proizilazi da su fononi kvazičestice bozonskog tipa⁷, sa svim pripadajućim osobinama. Opisivanje oscilatornog kretanja atoma u kristalima uvođenjem pojma fonona dozvoljava mogućnost da se unutrašnjost kristala razmatra kao fononski gas. Prilikom kretanja u svim smerovima, osim što se reflektuju od graničnih površina kristala, fononi se i međusobno sudaraju. Ovi sudari imaju za posledicu nastanak novih fonona koji se sa izmenjenim energijama kreću u nekom drugom smeru, dok upadni fononi nestaju. Ipak, pojam „fononskog gasa“ treba shvatiti uslovno, jer se zagrevanjem kristala povećava energija njegovih oscilacija, a to podrazumeva da raste i broj fonona. Broj fonona, dakle, nije stalan – pri zagrevanju oni nastaju, a hlađenjem kristala isčeza.

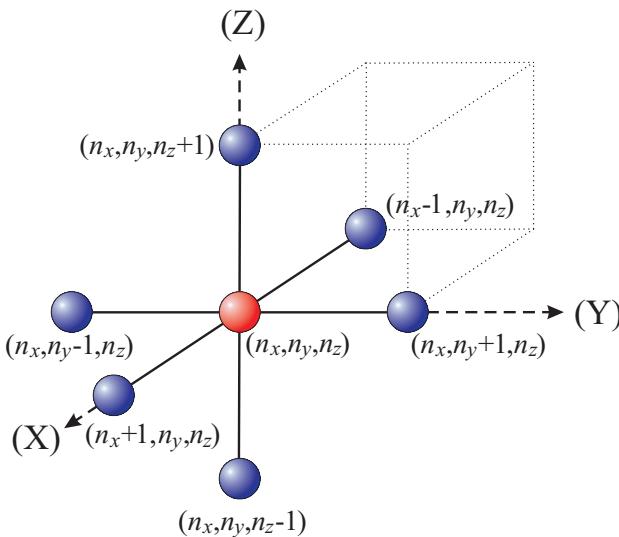
⁷Kada bi fononi bili fermionske kvazičestice, energija sistema ne bi zavisila od broja pobuđenja u njemu, tj. njena srednja energija od temperature, što je u suprotnosti sa svim poznatim eksperimentalnim činjenicama [55].

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 iz tog razloga 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 prenosi 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 kristalografskoj, ne moraju biti uzajamno ortogonalni, pa se zato u teorijskoj fizici kondenzovane materije uvodi dodatni Dekartov sistem. U ovoj disertaciji će biti posmatran samo kristal kubne strukture kod koga su uvedeni kristalografski pravci uzajamno ortogonalni. 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 – njihova masa. Drugi sabirak sa desne strane znaka jednakosti predstavlja efektivni međuatomski potencijal interakcije (V_{eff}).



Slika 2.2: Atom u okruženju najbližih suseda

Da bi se shvatio početak primene matematičkog formalizma priložena je slika 2.2, koja prikazuje \vec{n} -ti atom kristala u okruženju svojih najbližih suseda. Radi jednostavnosti, pretpostavlja se da se radi o prostoj kubnoj strukturi sa jednim atomom po elementarnoj celiji (primitivna celija). 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 [37,65–67]:

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

pri čemu su:

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

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

Torzione Hukove konstante $C_{\alpha\beta}$ su zanemarene u odnosu na konstante istezanja $C_\alpha \equiv C_{\alpha\alpha}$ [32], 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

Energijski spektri i stanja biće potraženi metodom Grinovih funkcija [37,42,46–50]. U tu svrhu posmatra se dvovremenska temperaturska Grinova funkcija oblika:

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

gde je: $\Theta(t-t')$ – Hevisajdova „step“ funkcija sa osobinom: $\frac{d}{d(t-t')} \Theta(t-t') = \delta(t-t')$, a $\langle [u_{\alpha;\vec{n}}(t), u_{\alpha;\vec{m}}(t')] \rangle_0$ – statistički usrednjeni korelator pomeraja. Dvostrukim diferenciranjem jednačine (2.12) po vremenu i neznatnim sređivanjem, 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:

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

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 \{ 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-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}) + \\ &+ 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}) \} = \\ &= -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} (6u_{\beta;m_x,m_y,m_z} - u_{\beta;m_x+1,m_y,m_z} - u_{\beta;m_x-1,m_y,m_z} - \\ &- u_{\beta;m_x,m_y+1,m_z} - u_{\beta;m_x,m_y-1,m_z} - u_{\beta;m_x,m_y,m_z+1} - u_{\beta;m_x,m_y,m_z-1}) . \end{aligned}$$

Ovde su iskorišćene komutacione relacije za pomeraje i impulse (2.11), kao i definicija Kro-nekerovog simbola

$$\delta_{p,q} = \begin{cases} 1 & \text{za } p = q, \\ 0 & \text{za } p \neq q. \end{cases}$$

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 nađenih 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:

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

gde je $\Omega_{\alpha}^2 = C_{\alpha}/M$, odnosno za:

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

pri čemu je: $\omega_{\alpha}(\vec{k}) = 2\Omega_{\alpha} \sqrt{\sum_j \sin^2 \frac{a_j k_j}{2}}$, $j \in (x, y, z)$. 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 poređenja ove relacije sa odgovarajućom za film-strukture, zgodno ju je napisati u sledećoj (bezdimenzionoj) formi:

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

U aproksimaciji malih talasnih vektora, za koju je $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}$ i uz uvođenje oznake: $a_x = a_y = a_z \equiv a$, poslednja relacija se svodi na:

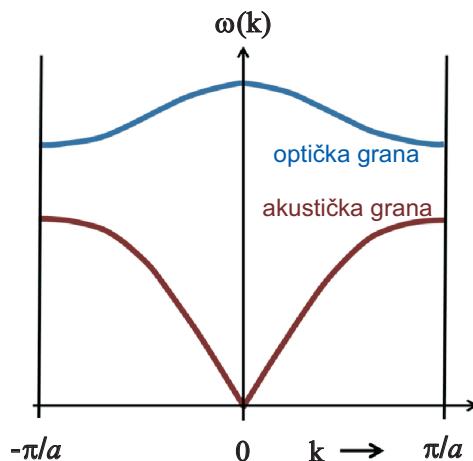
$$\mathcal{E}_{\alpha}(\vec{k}) = a k, \quad (2.20)$$

što predstavlja tipičan i poznat izraz za zakon disperzije akustičkih fonona.

Pažljiva razmatranja pokazuju da u kristalima postoji nekoliko tipova prostiranja talasnih poremećaja, koji se razlikuju po kretanju atoma unutar elementarne celije. Svaki tip fonona karakteriše specifična zavisnost energije od kvaziimpulsa. Kod niza sa tri stepena slobode postoje tri načina oscilovanja: jedan duž pravca niza i dva uzajamno normalna, u ravnima ortogonalnim na osu niza. U ovakvim sistemima se javlja mogućnost rasprostiranja dva vida talasa: longitudinalnih i transverzalnih, što sledi iz uslova normiranja. Kod longitudinalnih talasa, vektor pomeraja atoma $\vec{u}(\vec{k})$ usmeren je duž lanca i podudara se sa pravcem prostiranja talasa $\vec{e}_1 \parallel \vec{k}$. Kod transverzalnih talasa, vektor polarizacije \vec{e}_2 normalan je na osu lanca i na talasni vektor \vec{k} , $\vec{e}_2 \perp \vec{k}$. Za male vrednosti \vec{k} zakoni disperzije longitudinalnih i transverzalnih talasa imaju isti oblik:

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

U kristalima sa prostom elementarnom celijom sve tri komponente frekvencija mehaničkih talasa $\omega_{\alpha}(k)$ teže ka nuli kada $k \rightarrow 0$. Takvi kvanti mehaničkih pobuđenja sa linearnim zakonom disperzije nazivaju se *akustički fononi*. Ako se na sličan način analizira kristal složene strukture sa σ podrešetki po elementarnoj celiji, onda se za dozvoljene frekvencije dobija 3σ rešenja, od kojih tri frekvencije uvek teže nuli kada $k \rightarrow 0$ i odgovaraju akustičkim fononskim granama, dok za ostale ($3\sigma - 3$) grane važi $\lim_{k \rightarrow 0} \omega(k) \neq 0$, a mehaničke oscilacije sa ovom osobinom nazivaju se *optički fononi* (slika 2.3).



Slika 2.3: Disperzije krive fonona za kristalnu rešetku sa dvoatomnim bazisom

Ova razmatranja se odnose na fononske spektre u okviru jedne elementarne celije. Trodimenzionalni kristal sa N elementarnih celija i σ podrešetki ima $3N\sigma$ stepeni slobode kretanja. Fononski spektar onda uvek čine $3N\sigma$ akustičke grane i $3N\sigma - 3N\sigma$ optičkih grana. Treba, međutim, naglasiti da se u prostim kristalnim strukturama javljaju samo akustički, dok se u složenim, pored akustičkih, javljaju i optički fononi. Kako će dalje analize biti sprovedene za proste strukture, a dovešće do zakona disperzije fonona za tanke filmove, superrešetke, kvantne žice i tačke, koji će ukazati na postojanje odgovarajućeg energijskog gepa, umesno je podvući da fononi u nanostrukturnama spadaju u akustičke, ali se (s obzirom na to da pokazuju neke od osobina optičkih fonona – konkretno poseduju gep) još nazivaju *akustički fononi optičkog tipa*. Ovo se može tumačiti time da je za pobuđenje (nastanak) takvih fonona sistemu (kristalnom filmu) potrebno spolja dovesti energiju – najmanje jednaku veličini energijskog gepa, odnosno, potrebno mu je podići temperaturu iznad neke, aktivacione.

2.4 Gustina fononskih stanja

Gustina stanja odgovara broju dozvoljenih fononskih energijskih stanja po jedinici energijskog intervala oko date energije E . Veliki broj osobina kristala (posebno poluprovodnika), uključujući optičke (npr. koeficijent apsorpcije i emisije), termodinamičke i transportne osobine određen je gustinom njihovih stanja. Upravo je mogućnost planiranja gustine energijskih stanja jedna od glavnih motivacija upotrebe niskodimenzionih kvantnih struktura.

Funkcija spektralne gustine fonona daje raspodelu broja fonona sa različitim energijama na skali frekvencije [35–36,51–64]:

$$\mathcal{D}_\alpha(\omega) \equiv \frac{dn_\alpha}{d\omega} , \quad \mathcal{D}(\omega) = \sum_{\alpha=1}^{3\sigma} \mathcal{D}_\alpha(\omega) , \quad (2.21)$$

gde je n_α broj stanja u svim granama spektra (akustičkim i optičkim) za datu frekvenciju, a V zapremina. U opštem slučaju, ova funkcija se može izraziti kao:

$$\mathcal{D}(\omega) = V \sum_{\alpha=1}^{3\sigma} \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \delta(\omega - \omega_\alpha(\vec{k})) = V \sum_{\alpha=1}^{3\sigma} \int \frac{dS}{(2\pi)^3} \frac{1}{|\nabla \omega_\alpha(\vec{k})|} , \quad (2.22)$$

gde se poslednji integral uzima po površini I Briluenove zone, na kojoj je $\omega_\alpha(\vec{k}) = \text{const}$. Gustina stanja se može izračunati ako je poznat zakon disperzije $\omega = \omega_\alpha(\vec{k})$.

Gustina fononskih stanja može se odrediti i metodom Grinovih funkcija, a definiše se preko:

$$\mathcal{D}_{\vec{k}}(\omega) = M\hbar^{-1} \sum_{\vec{k}} g_{\vec{k}}(\omega) ,$$

gde je $g_{\vec{k}}(\omega)$ spektralna funkcija Grinove funkcije [32,58]. Ona se može izraziti kao:

$$g_{\vec{k}}(\omega) = 2 \operatorname{Re} \left\{ G_{\vec{k}}^\alpha(\omega + i\varepsilon) \right\} = \frac{\hbar}{2M\omega_{\vec{k}}^\alpha} \left[\delta(\omega - \omega_{\vec{k}}^\alpha) - \delta(\omega + \omega_{\vec{k}}^\alpha) \right]$$

i normira se na sledeći način:

$$\int_0^{\omega_{D/A}} d\omega \mathcal{D}_{\vec{k}}(\omega) = 1 ,$$

gde $\omega_{D/A}$ predstavlja Debajevu ili Ajnštajnovu frekvenciju.

Izračunavanje $\mathcal{D}(\omega)$ je u opštem slučaju veoma složen zadatak. Ipak, poznavanje tačnog oblika $\mathcal{D}(\omega)$, a naročito položaja maksimuma te funkcije na frekventnoj skali, od izuzetnog je značaja pri interpretaciji različitih fizičkih efekata i tumačenja eksperimentalnih rezultata u čvrstim telima (npr. pri izučavanju magneto-akustičkih rezonancija, volt-amperskih karakteristika tunelskih prelaza, u mesbauerovskoj spektroskopiji, superprovodnosti itd.) [35].

2.5 Fononska termodinamika

Mehaničke, magnetne i dielektrične osobine kristalnih supstanci u velikoj meri zavise od temperature. Najočigledniji primer materijala kod kojih se električne osobine drastično menjaju sa temperaturom nalazimo kod poluprovodnika [5–6,8–9,31,53], usled čega je za nesmetan rad visoko integrisanih elektronskih sklopova od suštinskog značaja odvođenje Džulove toplotne. U cilju određivanja osobina i mogućnosti primene pojedinih materijala neophodno je znati odakle potiče ova toplota, kako je materijal prima (tj. kolika mu je toplotna kapacitivnost) i kako se toplota prostire kroz materijal (tj. kolika mu je toplotna provodnost).

Termičke osobine kristalnih supstanci razjašnjene su – barem u opštim crtama – tek u prvim decenijama dvadesetog veka primenom kvantne mehanike [68–73]. Kao što je već ranije spomenuto, kristal se može posmatrati kao sistem međusobno povezanih oscilatora. Pomeraj jednog čvora kristalne rešetke izaziva dejstvo sile na susedne čvorove, a time i njihov pomak. Na taj način se kroz kristal prostire deformacija. Ako je uzrok njenog širenja oscilatorno kretanje, deformacija će biti periodična, tj. kroz kristal će se širiti talasno kretanje. S obzirom na talasno-korpuskularni dualizam, ovim talasima mogu se pridružiti čestična obeležja, tj. fononi odgovarajućih energija. Ukupna unutrašnja (toplotna) energija kristala nalazi se u fononima. Pri topotnom pobuđenju kristala (tj. zagrevanju) njihov broj se povećava, tj. povišenje energije kristala za $\hbar\omega$ znači pojavu jednog fonona.

2.5.1 Toplotna kapacitivnost kristalne rešetke

Toplotna kapacitivnost kristalne rešetke⁸ definiše se kao:

$$C_b \equiv \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_V , \quad (2.23)$$

gde je U – unutrašnja energija kristala, S – odgovarajuća promena entropije, a T – temperatura. Termodinamičko ponašanje gotovo svih karakteristika kristala određuju fononi, usled čega je neophodno proceniti njihov udio u ukupnoj topotnoj kapacitivnosti čvrstog tela, odnosno topotnoj kapacitivnosti posmatrane kristalne strukture (jer se obračun vrši po elementarnoj celiji datog kristala).

U vezi sa topotnom kapacitivnošću stoje sledeće eksperimentalne činjenice.

- U oblasti viših (sobnih) temperatura vrednost topotne kapacitivnosti praktično svih čvrstih tela približno iznosi $3Nk_B$, gde je N – broj atoma u uzorku.
- Sa snižavanjem temperature topotna kapacitivnost opada i teži nuli kao T^3 kod izolatora, odnosno kao T kod metala. Ukoliko metal postaje superprovodnik opadanje je još i brže.
- U magnetnim čvrstim telima postoji znatno povećanje topotne kapacitivnosti u blizini temperature pri kojoj magnetni momenti postaju uređeni.

Ajnštajnov model. 1907. godine Ajnštajn je postavio teoriju topotne kapacitivnosti zasnovanu na Plankovoj kvantnoj hipotezi, pretpostavljajući da svaki atom kristala osciluje oko svog ravnotežnog položaja frekvencijom ω . Svaki atom poseduje istu frekvenciju i osciluje nezavisno od svih ostalih atoma, što podrazumeva da je jedan mol kristala sastavljen od $3N$ jednodimenzionalih oscilatora. Normalne vibracije rešetke su međusobno nezavisne ukoliko je primenljiv Hukov zakon. To znači da energija jedne od vibracija kristalne rešetke zavisi samo od njene frekvencije ω i fononske zauzetosti stanja n , a nezavisna je od zauzetosti stanja svih ostalih vibracija rešetke. U stanju termodinamičke ravnoteže pri temperaturi T zauzetost stanja data je Plankovom ili Boze-Ajnštajnovom raspodelom:

$$\langle n \rangle = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1} . \quad (2.24)$$

Srednja vrednost energije jednog oscilatora frekvencije ω je $\langle n \rangle \hbar\omega$, dok je za N oscilatora koji imaju istu rezonantnu frekvenciju:

$$U = N \langle n \rangle \hbar\omega = \frac{N \hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1} , \quad (2.25)$$

⁸Pod ovim pojmom obično se podrazumeva topotna kapacitivnost pri konstantnoj zapremini. Indeks „ b “ ukazuje na to da se radi o balku, odnosno neograničenoj kristalnoj strukturi.

te je odgovarajuća topotna kapacitivnost čvrstog tela sastavljenog od N oscilatora sa istim rezonantnim frekvencijama ω prema (2.23), (2.24) i (2.25):

$$C_b = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = N k_B \left(\frac{\hbar\omega}{k_B T} \right)^2 \frac{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}}}{\left(e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1 \right)^2}.$$

Pošto svaki od N oscilatora (atoma) ima tri stepena slobode, prethodna jednačina se koriguje na sledeći način:

$$C_b = 3N k_B \left(\frac{\hbar\omega}{k_B T} \right)^2 \frac{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}}}{\left(e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1 \right)^2}.$$

U slučaju dovoljno visokih temperatura, kada je $k_B T \gg \hbar\omega$, važi razvoj:

$$e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} \approx 1 + \frac{\hbar\omega}{k_B T},$$

tako da se poslednja relacija svodi na:

$$C_b = 3N k_B, \quad (2.26)$$

što predstavlja poznati Dilon-Ptijev zakon, prema kome topotna kapacitivnost kristala ne zavisi od temperature. Sa druge strane, u slučaju niskih temperatura ($k_B T \ll \hbar\omega$) je:

$$e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} \gg 1,$$

tako da približno važi:

$$C_b \sim e^{-\frac{\hbar\omega}{k_B T}}.$$

Drugim rečima, kada se temperatura snižava, topotni kapacitet rešetke eksponencijalno teži ka nuli. Eksperimentalno je, međutim, ustanovljeno da je u tom slučaju $C_b \sim T^3$, što se može objasniti pomoću Debajevog modela. Nepotpunost Ajnštajnovog modela objašnjava se time što elastični talasi u čvrstom telu nemaju svi istu rezonantnu frekvenciju.

U okviru Ajnštajnovog modela, koji kristal tretira kao skup $3N$ nezavisnih kvantnih oscilatora koji osciluju sa sopstvenom frekvencijom $\omega_\alpha(\vec{k}) = \omega_A$, izraz za gustinu stanja optičkih fonona glasi:

$$\mathcal{D}_A(\omega) = \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \delta(\omega - \omega_A) = N \delta(\omega - \omega_A). \quad (2.27)$$

Broj tih oscilatora je $3(\sigma - 1)N$, gde je σ broj podrešetaka u celiji.

Debajev model. Ajnštajnov pristup je previše jednostavan, s obzirom da atomi ne osciluju nezavisno, već formiraju sistem međusobno povezanih oscilatora, usled čega je za očekivati da će frekventni spektar sadržati ukupno $3N$ normalnih modova. 1912. godine Debaj je prepostavio da je frekventni spektar isti kao kod elastičnog kontinuma sa visokofrekventnom granicom ω_D . Energija sistema oscilatora različitih frekvencija $\omega(\vec{k})$ koji se nalaze u stanju termodinamičke ravnoteže, data je sa:

$$U = \sum_{\vec{k}} \langle n_{\vec{k}} \rangle \hbar\omega_{\vec{k}},$$

gde je svako $\langle n_{\vec{k}} \rangle$ povezano sa $\omega_{\vec{k}}$ preko Boze-Ajnštajnove raspodele (2.24). Sumu u ovoj relaciji često je pogodno zameniti integralom: ako se prepostavi da kristal poseduje $\mathcal{D}(\omega) d\omega$ vibracija u frekventnom intervalu od ω do $\omega + d\omega$, tada je:

$$U = \int d\omega \mathcal{D}(\omega) \langle n(\omega, T) \rangle \hbar\omega ,$$

gde je \mathcal{D} fononska gustina stanja definisana relacijom (2.22). Toplotna kapacitivnost se određuje diferenciranjem $\langle n(\omega, T) \rangle$ po temperaturi, ali je prethodno neophodno pronaći fononsku gustinu stanja po jediničnom intervalu frekvencija $\mathcal{D}(\omega)$.

Prepostavimo da sve tri akustične grane spektra karakteriše u dugotalasnoj aproksimaciji linearni zakon disperzije $\omega_{\alpha}(k) = v \cdot k$. Ova relacija važi u izotropnom elastičnom kontinuumu. Da bi ona ostala na snazi i u kristalu koji poseduje karakterističnu atomsku strukturu, neophodno je da talasna dužina zvučnih talasa bude mnogo veća od međuatomskog rastojanja ($\lambda \gg a$). S obzirom na vezu između talasne dužine i talasnog broja u obliku:

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} ,$$

sledi da se Debajeva aproksimacija uspešno primenjuje na niskofrekventne oscilatore, odnosno u oblasti malih talasnih vektora. Smatruјući, takođe, da talasni vektori fonona leže u sferi radijusa k_D , a ne u I Briluenovoj zoni, izraz (2.22) dobija jednostavniji oblik:

$$\mathcal{D}_D(\omega) = \frac{3V}{(2\pi)^3} \int_0^{\pi} \sin \theta \, d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{k_D} k^2 \, dk \delta(\omega - vk) = \begin{cases} \frac{3V}{2\pi^2} \frac{\omega^2}{\bar{v}^3}, & \text{za } \omega < \omega_D , \\ 0, & \text{za } \omega > \omega_D , \end{cases} \quad (2.28)$$

gde je:

$$\bar{v} = 3^{\frac{1}{3}} \left(\frac{2}{v_t^3} + \frac{1}{v_{\ell}^3} \right)^{-\frac{1}{3}}$$

srednja brzina zvuka u kristalu (v_t je transverzalna, a v_{ℓ} longitudinalna komponenta brzine), a ω_D – Debajeva frekvencija, koja se određuje preko maksimalne vrednosti talasnog vektora u prvoj Briluenovoj zoni. Ako posmatrani uzorak sadrži N elementarnih celija, tada je ukupni broj stanja akustičkih fonona jednak N , a Debajeva frekvencija se određuje iz uslova normiranja:

$$N = \int_0^{\omega_D} \mathcal{D}_D(\omega) \, d\omega = \frac{V \omega_D^3}{6\pi^2 v^3} = \frac{Na^3 \omega_D^3}{6\pi^2 v^3}$$

(broj čvorova rešetke jednak je broju fononskih stanja), odakle je:

$$\omega_D = \frac{\sqrt[3]{6\pi^2}}{a} \cdot v . \quad (2.29)$$

Maksimalna vrednost talasnog vektora u I Briluenovoj zoni (Debajev talasni vektor) može se odrediti na osnovu prethodno uvedene aproksimacije da talasni vektori fonona leže u sferi radijusa k_D , na osnovu čega proizilazi⁹:

$$V = \left\{ \begin{array}{l} \frac{4}{3} \pi \left(a k_D^b \right)^3 \\ a^3 \Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z \end{array} ; \quad k_{x/y/z} \in \left[-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a} \right] \Rightarrow \Delta k_x = \Delta k_y = \Delta k_z = \frac{2\pi}{a} , \right.$$

⁹Indeks „b” u označi za talasni vektor k_D^b podrazumeava da je on definisan za neograničenu kristalnu strukturu, tj. balk.

te je:

$$\frac{4}{3} \pi (ak_D^b)^3 = a^3 \Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z = 8\pi^3 \Rightarrow k_D^b = \frac{\sqrt[3]{6\pi^2}}{a}. \quad (2.30)$$

Upoređivanjem jednačina (2.29) i (2.30) zaključujemo da je:

$$\omega_D = k_D^b \cdot v.$$

Preko Debajeve frekvencije uvodi se i njoj odgovarajuća Debajeva temperatura pomoću relacije:

$$k_B T_D = \hbar \omega_D,$$

(k_B je Boltzmanova konstanta), odakle je:

$$T_D = \frac{\hbar \omega_D}{k_B} = \frac{\hbar v k_D}{k_B} = \frac{\sqrt[3]{6\pi^2} \hbar v}{a k_B}. \quad (2.31)$$

Procena reda veličine Debajeve temperature može se dobiti uzimajući da je $k_D \sim 10^8 \text{ cm}^{-1}$ i $\omega_D \sim 10^{13} \text{ s}^{-1}$, na osnovu čega sledi: $T_D \sim 10 \text{ K}$. Debajeve temperature ($T < 10 \text{ K}$) su takve da se može prepostaviti da akustičke grane poseduju energije proporcionalne talasnom vektoru:

$$\hbar \omega_\alpha(\vec{k}) = \hbar v_\alpha k \quad \text{za } ak_{max} \approx 0,1,$$

gde je v_α – brzina zvuka odgovarajuće grane oscilovanja, reda veličine $v_\alpha \sim (10^3 \div 10^5) \text{ m/s}$, ako je $a \approx 10^{-10} \text{ m}$.

Unutrašnja energija je sada, prema (2.24) i (2.28), data sa:

$$U = \int d\omega \mathcal{D}(\omega) \langle n(\omega, T) \rangle \hbar \omega = \int_0^{\omega_D} d\omega \left(\frac{\omega^2 V}{2\pi^2 v^3} \right) \left(\frac{\hbar \omega}{e^{\frac{\hbar \omega}{k_B T}} - 1} \right),$$

što se može napisati u obliku:

$$U = \frac{V}{2\pi^2 v^3 \hbar^3} (k_B T)^4 \int_0^{\omega_D} \frac{\left(\frac{\hbar \omega}{k_B T} \right)^3}{e^{\frac{\hbar \omega}{k_B T}} - 1} d\left(\frac{\hbar \omega}{k_B T} \right).$$

Ako se – radi jednostavnosti – prepostavi da je fononska brzina nezavisna od polarizacije, prethodni izraz množi se faktorom 3 i dobija:

$$U = 9Nk_B T \left(\frac{T}{T_D} \right)^3 \int_0^{x_D} \frac{x^3}{e^x - 1} dx, \quad (2.32)$$

gde je N – broj atoma u datom uzorku, $x = \frac{\hbar \omega}{k_B T}$, a $x_D = \frac{\hbar \omega_D}{k_B T}$. Toplotna kapacitivnost određuje se diferenciranjem ovog izraza po temperaturi:

$$C_b = 9Nk_B T \left(\frac{T}{T_D} \right)^3 \int_0^{x_D} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx. \quad (2.33)$$

U slučaju visokih temperatura:

$$T \gg T_D = \frac{\hbar v}{k_B a} \sqrt[3]{6\pi^2},$$

integraciona promenljiva x je u celoj oblasti veoma mala, što dozvoljava primenu aproksimativne formule:

$$e^x \approx 1 + x \quad \text{za} \quad x \ll 1 ,$$

te se relacija (2.32) svodi na:

$$U = 9Nk_B T \left(\frac{T}{T_D} \right)^3 \frac{x_D^3}{3} = 3Nk_B T$$

i konačno:

$$C_b = 3Nk_B .$$

Dakle, u visokotemperaturskom području Debajeva aproksimacija svodi se na Dilon-Ptijevo pravilo (2.26). U cilju upoređivanja ove vrednosti sa vrednostima dobijenim za film-strukture, kvantne žice i kvantne tačke, pogodno je toplotnu kapacitivnost obračunati po jednoj elementarnoj ćeliji kristala:

$$C_b^* = \frac{1}{N} \frac{\partial U}{\partial T} = 3k_B . \quad (2.34)$$

U granicama niskih temperatura, kada $x_D \rightarrow \infty$, vrednost integrala u relaciji (2.32) uzima se iz tablica integrala [55–57]:

$$\int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^4}{15} ,$$

pa je:

$$U = \frac{3\pi^4}{5} Nk_B T \left(\frac{T}{T_D} \right)^3 ,$$

te se za toplotnu kapacitivnost dobija izraz:

$$C_b = \frac{12\pi^4}{5} Nk_B \left(\frac{T}{T_D} \right)^3 , \quad (2.35)$$

tj. toplotna kapacitivnost pri niskim temperaturama srazmerna je trećem stepenu temperature, što je u saglasnosti sa eksperimentalnim rezultatima i predstavlja tzv. Debajev T^3 – zakon. Toplotna kapacitivnost obračunata po jednoj elementarnoj ćeliji kristala iznosi:

$$C_b^* = \frac{1}{N} \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{12\pi^4}{5} k_B \left(\frac{T}{T_D} \right)^3 \equiv C_0 \cdot \mathcal{T}^3 , \quad (2.36)$$

gde je:

$$C_0 = \frac{12\pi^4}{5} k_B ,$$

a

$$\mathcal{T} = \frac{T}{T_D} .$$

Jednostavnost Debajevog prilaza sastoji se u tome da se ceo termodinamički aspekt fonona u kristalu izražava preko jednog parametra $\theta_D = k_B T_D$. Debajeva temperatura igra važnu ulogu u teoriji oscilacija kristalne rešetke i eksperimentalno se određuje merenjem toplotne kapacitivnosti na niskim temperaturama. Ona odvaja niskotemperatursku oblast, gde se mora koristiti kvantna statistika, od visokotemperaturske gde važi i klasična statistička mehanika. Za različita tela θ_D je različita [35,54–57], ali sva tela pokazuju istu zavisnost toplotne kapacitivnosti i entropije od redukovane temperature T/T_D .

Uprkos aproksimacijama, Debajeva teorija se slaže sa eksperimentima. Kao kod Ajnštajnovog modela, u visokotemperaturskom limesu dobija se dobro slaganje sa klasičnim rezultatima za specifičnu toplotnu kapacitivnost. Pri niskim temperaturama specifična toplotna kapacitivnost i entropija se ponašaju $\sim T^3$. Time je kvantna teorija objasnila odstupanje klasične teorije od eksperimenta.

2.5.2 Toplotna provodnost

Toplotna provodnost metala

Provodenje toplote u metalu se sastoji od dve komponente: elektronske provodljivosti i toplotne provodnosti rešetke [68–71], pa se i koeficijent toplotne provodnosti može napisati u obliku zbiru:

$$\kappa = \kappa_e + \kappa_p . \quad (2.37)$$

Stacionarni karakter procesa prenošenja toplote se obezbeđuje pomoću nekoliko mehanizama relaksacije. Kod elektronske toplotne provodnosti ti mehanizmi su:

- sudari elektrona sa primesama κ_{ed} ,
- sudari elektrona sa fononima κ_{ep} ,
- međusobni sudari elektrona κ_{ee} .

Mehanizmi relaksacije kod toplotne provodnosti rešetke su:

- sudari fonona i elektrona κ_{ep} ,
- međusobni sudari fonona κ_{pp} ,
- sudari fonona sa granicama, defektima i primesama κ_{pd} .

Praktično postoji šest mehanizama toplotne provodnosti. Za egzaktno nalaženje koeficijenta toplotne provodnosti treba rešiti potpunu kinetičku jednačinu koja obuhvata svih šest mehanizama.

Toplotna otpornost za odgovarajući tip nosilaca može se napisati kao zbir toplotnih otpornosti koji odgovaraju različitim mehanizmima:

$$\begin{aligned} \kappa_e^{-1} &\approx \kappa_{ed}^{-1} + \kappa_{ep}^{-1} + \kappa_{ee}^{-1} ; \\ \kappa_p^{-1} &\approx \kappa_{pe}^{-1} + \kappa_{pp}^{-1} + \kappa_{pd}^{-1} . \end{aligned} \quad (2.38)$$

U zavisnosti od uslova, različiti mehanizmi imaju različiti uticaj. Kod običnih metala osnovni udio u prenošenju toplote daje elektronska komponenta κ_e , dok fononska komponenta κ_p čini svega nekoliko procenata ukupne toplotne provodnosti. Temperaturska zavisnost κ_e normalnih metala je definisana relacijom [28,30,33,68–71]:

$$\frac{1}{\kappa_e^n} = \alpha T^2 + \frac{\beta}{T} . \quad (2.39)$$

Prvi član je određen interakcijom elektrona i fonona, a drugi rasejanjem elektrona na defektima, primesama ili granicama kristala. U idealnom kristalu toplotna provodnost bila bi data samo prvim članom i težila bi u ∞ kada $T \rightarrow 0$ K. Ipak, na dovoljno niskim temperaturama elektroni se rasejavaju na uvek prisutnim defektima i primesama što postepeno dovodi do linearog opadanja toplotne provodnosti kada $T \rightarrow 0$ K. Pri nekoj temperaturi, koja je određena čistoćom uzorka, uočava se maksimum toplotne provodnosti normalnih metala. Što je veća koncentracija primesa, maksimum se pomera ka višim temperaturama. Ova relacija se može transformisati u oblik:

$$\frac{T}{\kappa_e^n} = \alpha T^3 + \beta , \quad (2.40)$$

gde se uočava linearna zavisnost od T^3 , što je i eksperimentalno potvrđeno. Povećanje učešća primesa u materijalu ne menja koeficijent α , dok koeficijent β raste.

Uticaj rešetke na toplotnu provodnost kod normalnih metala je mali. Njena mala vrednost kod metala je uslovljena velikim rasejanjem fonona na slobodnim elektronima. Međutim, kod dielektrika je fononska toplotna provodnost srazmerno velika.

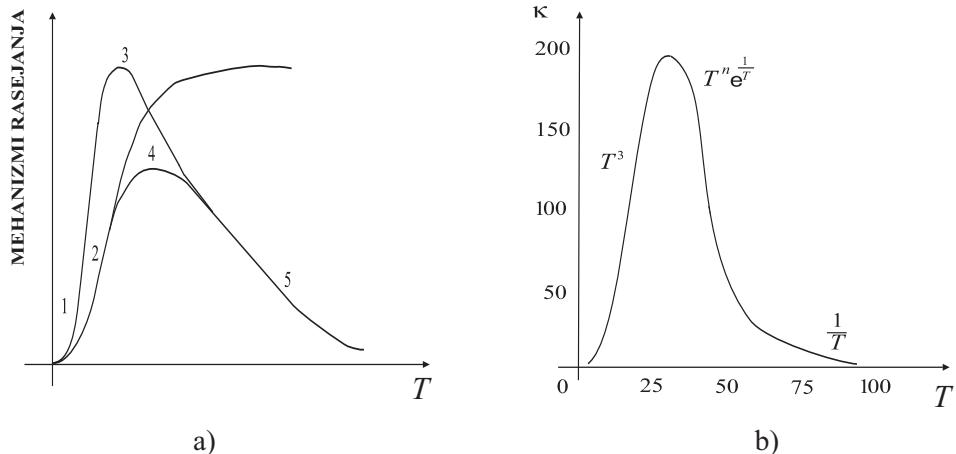
Toplotna provodnost dielektrika

Osnovni udeo u prenošenju toplote kod dielektrika daju fononi. Mehanizmi toplotne provodnosti u dielektricima su, osim sudara među fononima ($N - i U -$ procesi)¹⁰ i sudari fonona sa primesama, defektima kristalne rešetke ili sudari fonona sa granicama kristala.

Temperaturska zavisnost mehanizama rasejanja fonona je sledeća [28–30]:

- rasejanje na granicama uzorka $\sim BT^{-3}$,
- rasejanje na elektronima $\sim ET^{-2}$,
- rasejanje na dislokacijama $\sim DT^{-2}$,
- rasejanje na tačkastim defektima $\sim PT$,
- rasejanje na drugim fononima $\sim gT^n e^{-\frac{\eta}{mT}}$.

Na slici 2.4 prikazana je temperaturska zavisnost mehanizama relaksacije na granicama (1), elektronima (2), $U -$ procesima (3), nečistoćama (4) i usled anharmonijskih veza (5).



Slika 2.4: a) Temperaturska zavisnost mehanizama relaksacije ;
b) Toplotna provodnost Al_2O_3 u širem temperaturskom intervalu

Ukupna fononska toplotna otpornost je [28–30]:

$$\kappa_p^{-1} = BT^{-3} + ET^{-2} + DT^{-2} + PT + gT^n e^{-\frac{\eta}{mT}}. \quad (2.41)$$

¹⁰Normalni fonon-fononski procesi su procesi u kojima se ukupni kvaziimpuls održava, tj. $\vec{P} = \sum_{\vec{q}} n_{\vec{q}} \hbar \vec{q} = \text{const.}$

Normalni procesi ($N -$ procesi) rasejanja fonona na fononima ne menjaju veličinu \vec{P} . Stoga ukupni protok toplote, koji ima datu vrednost \vec{P} , neće biti prigušen i toplotna provodnost mora biti beskonačna. To znači da je u uzorku prisutna konvekcija fonona. Toplotna provodnost u kristalu biće konačna zahvaljujući postojanju procesa preskoka ($U -$ procesa). To su procesi u kojima se ukupni početni i krajnji kvaziimpulsi razlikuju za nenulti vektor recipročne rešetke. U ovim procesima se kvaziimpuls ne održava i to dovodi do smanjenja proticanja toplote, tj. protok toplote postaje konačan.

Temperatursko ponašanje toplotne provodnosti izolatora u celokupnom opsegu temperatura je sledeće: pri niskim temperaturama toplotna provodnost će rasti proporcionalno T^3 isto kao i toplotna kapacitivnost, jer se brže povećava srednji slobodni put fonona nego što se smanjuje njihov broj. Vrednosti su i do nekoliko stotina puta veće od vrednosti pri sobnoj temperaturi. Rast traje sve dok se ne postigne temperatura pri kojoj su procesi preskoka toliko učestali da srednji slobodni put ne bude manji od srednjeg slobodnog puta koji odgovara rasejanju na granici kristala (tj. dok srednji slobodni put fonona ne postane uporediv sa dimenzijama uzorka). U toj tački postoji maksimum toplotne provodnosti koja zatim počinje eksponencijalno da opada. To je zato što se sa daljim snižavanjem temperature smanjuje broj fonona, a efektivni srednji fononski slobodni put nije više moguće produžiti.

Na srednji slobodni put fonona pri niskim temperaturama bitno mogu uticati primeši i defekti kristalne rešetke. To znači da se odgovarajućim postupcima u proizvodnji materijala može uticati na toplotnu provodljivost.

Na visokim temperaturama (znatno višim od T_D) toplotna provodnost dielektrika takođe opada, ali ne eksponencijalno već сразмерно $1/T$ što je posledica postojanja velikog broja fonona sposobnih da učestvuju u procesima rasejanja (sa preskokom), dok toplotna kapacitivnost teži konstantnoj vrednosti.

U čistim kristalima na temperaturama $T > T_D$ toplotna provodnost se može izraziti [30] kao:

$$\kappa = \kappa_0 \frac{T_D}{T} ; \quad \kappa_0 \approx 5 \cdot 10^{-8} \frac{\bar{A}aT_D^2}{\gamma^2}, \quad (2.42)$$

gde je \bar{A} srednja atomska težina, a konstanta rešetke merena u 10^{-10} m, T_D Debajeva temperatura izražena u K, a γ Grinajzenova konstanta. U slučaju $T < T_D$:

$$\kappa = a \left(\frac{T}{T_D} \right)^3 e^{\frac{T_D}{bT}} , \quad (2.43)$$

gde su a i b konstante koje se određuju eksperimentalno.

Fononi i toplotna provodnost

Pri toplotnom pobuđenju kristala u njemu nastaju fononi. Oni se prostiru kroz kristal brzinom zvuka i prenose toplotnu energiju. Opisivanje oscilacija kristalne rešetke pomoću fonona dozvoljava da se unutrašnjost kristala razmatra kao fononski gas: krećući se u svim smerovima fononi se – pored toga što se reflektuju na graničnim površinama kristala – takođe i međusobno sudaraju. Rezultat tih sudara su novi fononi koji se sa izmenjenim energijama kreću u nekom drugom smeru, dok prvo bitni fononi nestaju. Koeficijent toplotne provodnosti čvrstog tela [51–64] najjednostavnije je definisati preko gustine toplotnog fluksa \vec{j} na sledeći način: ukoliko u čvrstom telu postoji temperaturski gradijent ∇T , gustina toplotnog fluksa data je sa:

$$\vec{j} = -\kappa \nabla T ,$$

gde je κ – koeficijent toplotne provodnosti. Negativan predznak u ovoj relaciji pokazuje da je smer toplotnog fluksa suprotan od smera temperaturskog gradijenta, odnosno toplotna struja teče od toplijeg ka hladnjem kraju tela. Na osnovu elementarne kinetičke teorije [54–57] proizilazi da je:

$$\kappa = \frac{1}{3} Cv\lambda ,$$

gde je C – toplotna kapacitivnost fonona, v – njihova brzina i λ – fononski srednji slobodni put. Dakle, pri datom temperaturskom gradijentu gustina toplotnog fluksa proporcionalna je

gustini fonona (izraženoj toplotnim kapacitetom jedinice zapremine), njihovoj brzini i srednjem slobodnom putu. U ovoj relaciji učinjena je aproksimacija utoliko što je pretpostavljeno da se svi fononi kreću istom brzinom v . Ovaj uslov je približno ispunjen sve dok se frekvencija fonona ne približi graničnoj Debajevoj frekvenciji ω_D .

Uzimajući u obzir da se koeficijent difuzije¹¹ [74–76] može izraziti kao:

$$D = \frac{1}{3} \langle v \rangle \langle l \rangle ,$$

dolazi se do ekvivalentnog izraza za koeficijent toplotne provodnosti:

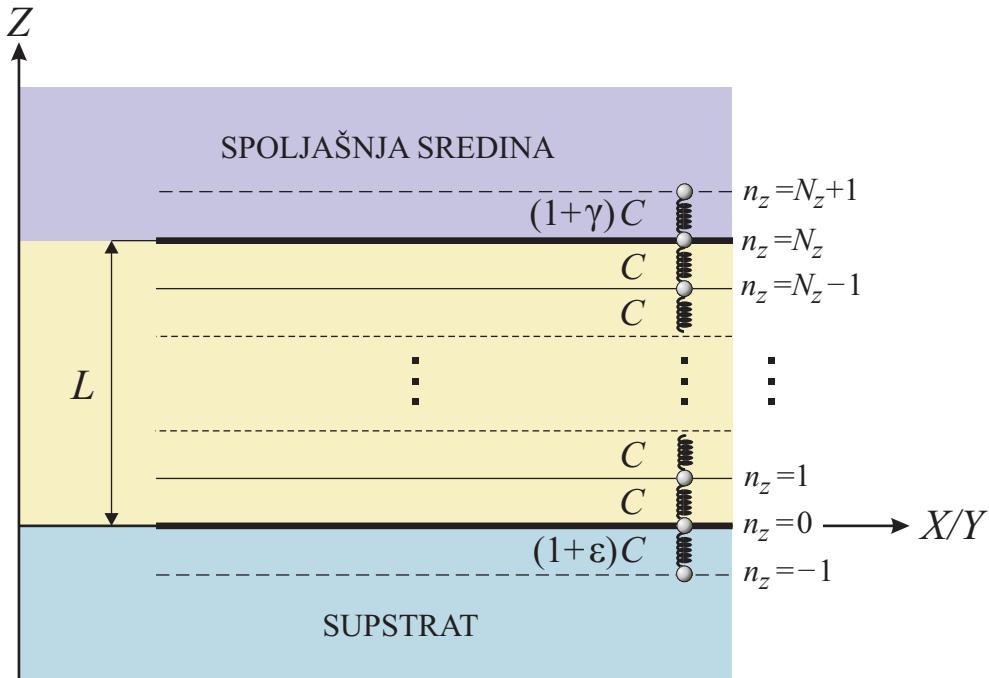
$$\kappa = C_v D = \frac{C}{V} D = C D \rho_M . \quad (2.44)$$

Ovde je C specifična toplotna kapacitivnost, a ρ_M gustina materijala. Radi nalaženja koeficijenta toplotne provodnosti prvo tražimo koeficijent difuzije i promene gustine sa temperaturom, pošto je izraz za toplotnu kapacitivnost poznat.

¹¹Koeficijent difuzije je, preciznije govoreći, tensorska veličina!

3 Fononi u tankim kristalnim filmovima

Tanki kristalni filmovi predstavljaju ograničene kristalne strukture kod kojih se uslovi na granicama razlikuju od onih u unutrašnjosti [5–7, 65–67, 77–80], tj. kod kojih je translaciona simetrija narušena duž pravca normalnog na film (z –pravac na slici 3.1).



Slika 3.1: Poprečni presek (u $X/Y - Z$ ravnini) 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. U suprotnom, ako ove deformacije postoje (npr. kao posledice dopingovanja stranim atomima), tada se ta struktura naziva deformisanim filmom.

3.1 Model filma

Posmatra se idealni¹² tanki film kubne kristalne strukture načinjen na supstratu nekim tehničko-tehnološkim postupkom (naparavanjem, raspršivanjem i sl.), čiji su osnovni kristalografski podaci (slika 3.1):

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

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

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

gde je a konstanta kristalne rešetke, $N_{x/y/z}$ su brojevi atoma duž x, y i z –pravaca, C^α –Hukove konstante elastičnosti i $n_z \in (0, 1, 2, \dots, N_z)$ indeks rešetke duž z –pravca. Na osnovu toga, o modelu se može zaključiti sledeće:

¹²Pojam „idealni“ koristi se u smislu nenarušenja kristalne strukture (bez prisustva defekata, primesa i sl.), a ne u smislu njene prostorne neograničenosti.

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 ($L = N_z a$).
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 .
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 površi nema atoma (motiva, čvorova) filma, ali su granični atomi „spregnuti” izmenjenim Hukovim silama za atome sredine, odnosno supstrata [37–40]. U skladu sa napred navedenim uslovima, konstante elastičnosti koje opisuju interakciju atoma graničnih površi 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:

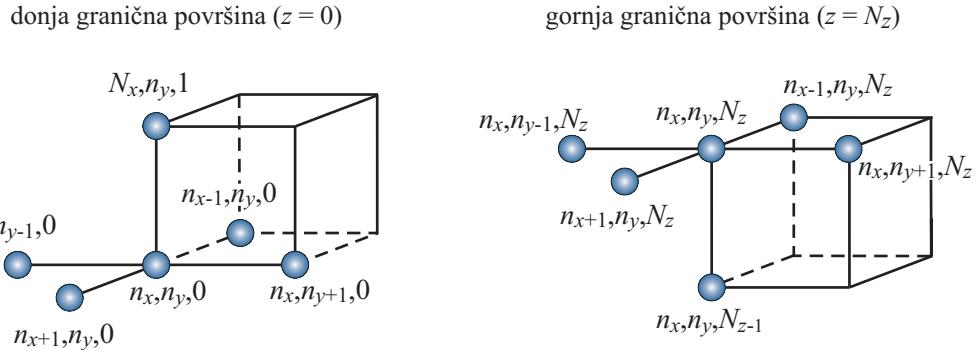
$$u_{\alpha;n_x,n_y,j} = 0 ; \quad -1 \geq j \wedge j \geq N_z + 1 ; \quad (j \notin [0, N_z]) ,$$

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

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 važilo: $C_{-1} = C_{N_z+1} = C$ ($\varepsilon = \gamma = 0$), bio bi to efekat „slobodnih površi” [42,65–67]. S obzirom na definisani model, hamiltonijan fononskog podsistema opisanog filma u aproksimaciji najbližih suseda ima isti oblik kao i kod neograničenih kristala – izrazi (2.8–2.10), 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 – standardni kinetički član, V_{eff}^P – površinski, a V_{eff}^Z – zapreminske potencijal interakcije.



Slika 3.2: Granične površine kristalnog filma

Površinski potencijal interakcije odnosi se na granične površine filma (slika 3.2) i oblika je:

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

Zapreminska potencijal interakcije je onda sledećeg oblika:

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

3.2 Jednačine kretanja

Zakon disperzije fonona i u ovom slučaju se nalazi, kao i u prethodnoj glavi, metodom Grinovih funkcija, pronalaženjem Grinove funkcije 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 i dobija se:

- za $n_z = 0$,

$$\begin{aligned}
 &- M\omega^2 G_{n_x, n_y, 0; m_x, m_y, m_z}^\alpha = -\frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{n_x, m_x} \delta_{n_y, m_y} \delta_{0, m_z} - \\
 &- C \left[(6 + \varepsilon) G_{n_x, n_y, 0; m_x, m_y, m_z}^\alpha - G_{n_x, n_y, 1; m_x, m_y, m_z}^\alpha - G_{n_x+1, n_y, 0; m_x, m_y, m_z}^\alpha - \right. \\
 &\left. - G_{n_x-1, n_y, 0; m_x, m_y, m_z}^\alpha - G_{n_x, n_y+1, 0; m_x, m_y, m_z}^\alpha - G_{n_x, n_y-1, 0; m_x, m_y, m_z}^\alpha \right], \quad (3.4)
 \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned}
 &- M\omega^2 G_{n_x, n_y, n_z; m_x, m_y, m_z}^\alpha = -\frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{n_x, m_x} \delta_{n_y, m_y} \delta_{n_z, m_z} - \\
 &- C \left(6 G_{n_x, n_y, n_z; m_x, m_y, m_z}^\alpha - G_{n_x+1, n_y, n_z; m_x, m_y, m_z}^\alpha - G_{n_x-1, n_y, n_z; m_x, m_y, m_z}^\alpha - \right. \\
 &\left. - G_{n_x, n_y+1, n_z; m_x, m_y, m_z}^\alpha - G_{n_x, n_y-1, n_z; m_x, m_y, m_z}^\alpha - G_{n_x, n_y, n_z+1; m_x, m_y, m_z}^\alpha - G_{n_x, n_y, n_z-1; m_x, m_y, m_z}^\alpha \right), \quad (3.5)
 \end{aligned}$$

- za $n_z = N_z$,

$$\begin{aligned}
 &- M\omega^2 G_{n_x, n_y, N_z; m_x, m_y, m_z}^\alpha = -\frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{n_x, m_x} \delta_{n_y, m_y} \delta_{N_z, m_z} - \\
 &- C \left[(6 + \gamma) G_{n_x, n_y, N_z; m_x, m_y, m_z}^\alpha - G_{n_x, n_y, N_z-1; m_x, m_y, m_z}^\alpha - G_{n_x+1, n_y, N_z; m_x, m_y, m_z}^\alpha - \right. \\
 &\left. - G_{n_x-1, n_y, N_z; m_x, m_y, m_z}^\alpha - G_{n_x, n_y+1, N_z; m_x, m_y, m_z}^\alpha - G_{n_x, n_y-1, N_z; m_x, m_y, m_z}^\alpha \right]. \quad (3.6)
 \end{aligned}$$

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

$$G_{n_x, n_y, n_z; m_x, m_y, m_z}^\alpha \equiv G_{\vec{n}, \vec{m}}^\alpha(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{k_x, k_y} e^{-ia[(n_x - m_x)k_x + (n_y - m_y)k_y]} G_{n_z, m_z}^\alpha(k_x, k_y; \omega) \quad (3.7)$$

na sistem jednačina (3.4–3.6), 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:

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

što se koncizno može napisati u obliku:

$$G_{n_z-1,m_z}^\alpha + (\varrho_k^\alpha - \varepsilon \delta_{n_z,0} - \gamma \delta_{n_z,N_z}) G_{n_z,m_z}^\alpha + G_{n_z+1,m_z}^\alpha = \mathcal{K} \delta_{n_z,m_z}. \quad (3.8)$$

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

$$\varrho_k^\alpha = \frac{\omega^2}{\Omega_\alpha^2} - 4 \left(\sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y}{2} \right) - 2 \equiv \varrho. \quad (3.9)$$

Sistem jednačina (3.8) ima rešenja koja mogu da se prikažu u obliku $G_{a,b} = \mathcal{D}_a / \mathcal{D}$, gde je \mathcal{D}_a odgovarajuća zamenska, a \mathcal{D} determinanta sistema:

$$\mathcal{D}_{N_z+1}(\varrho) = \begin{vmatrix} \varrho - \varepsilon & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & \varrho & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \varrho & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \ddots & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & \varrho & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & \varrho & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & \varrho - \gamma \end{vmatrix}_{N_z+1}. \quad (3.10)$$

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

$$\begin{aligned}
 \mathcal{D}_{N_z+1}(\varrho) &= (\varrho - \varepsilon)(\varrho - \gamma) \mathcal{P}_{N_z-1}(\varrho) - (2\varrho - \varepsilon - \gamma) \mathcal{P}_{N_z-2}(\varrho) + \mathcal{P}_{N_z-3}(\varrho) = \\
 &= \mathcal{P}_{N_z+1}(\varrho) - (\varepsilon + \gamma) \mathcal{P}_{N_z}(\varrho) + \varepsilon\gamma \mathcal{P}_{N_z-1}(\varrho)
 \end{aligned} \quad (3.11)$$

(pogledati u [37,81–82]).

3.3 Spektri i stanja fonona u filmu

U cilju određivanja spektra dozvoljenih fononskih energija, koji se dobija iz (3.8) 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 (3.10), odnosno rešavanje jednakosti:

$$\mathcal{D}_{N_z+1}(\varrho; \varepsilon, \gamma) \equiv 0 \implies \varrho = \varrho_\nu(\varepsilon, \gamma); \quad \nu = 1, 2, 3, \dots, N_z + 1. \quad (3.12)$$

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

U slučaju modela slobodnih površi, kada su: $\varepsilon = \gamma = 0$, ovaj problem ima analitičko rešenje. Izraz (3.11) tada prelazi u:

$$\mathcal{D}_{N_z+1}(\varrho) = \varrho^2 \mathcal{P}_{N_z-1}(\varrho) - 2\varrho \mathcal{P}_{N_z-2}(\varrho) + \mathcal{P}_{N_z-3}(\varrho) . \quad (3.13)$$

Uzimajući u obzir rekurentnu relaciju za polinome Čebiševa [81–82], te stavljajući: prvo $n = N_z - 1$, potom $n = N_z - 2$ i na kraju $n = N_z$, izraz (3.13) se svodi na:

$$\mathcal{D}_{N_z+1}(\varrho) = \varrho \mathcal{P}_{N_z}(\varrho) - \mathcal{P}_{N_z-1}(\varrho) \equiv \mathcal{P}_{N_z+1}(\varrho) . \quad (3.14)$$

Determinanta (3.10) sistema jednačina (3.8) se izražava direktno preko karakterističnih polinoma Čebiševa reda N_z . Iz uslova (3.11) slede nule Čebiševljevih polinoma, a uzimajući u obzir i izraz (3.9), 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:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_\mu^\alpha(\vec{k}) &\equiv \hbar \omega_\mu^\alpha(\vec{k}) = 2 \sqrt{\mathcal{R}_{xy} + \mathcal{S}_z(\mu)} ; & \mathcal{E}_\mu^\alpha(\vec{k}) &= \frac{E_\mu^\alpha(\vec{k})}{E_0} , & E_0 &= \hbar \Omega_\alpha ; \\ \mathcal{R}_{xy} &\equiv \mathcal{R}_{k_x k_y} = \sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y}{2} ; & \mathcal{S}_z(\mu) &= \sin^2 \frac{ak_z(\mu)}{2} . \end{aligned} \quad (3.15)$$

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:

$$k_z(\mu) = \frac{\pi}{a} \frac{\mu}{N_z + 2} ; \quad \mu = 1, 2, 3, \dots, N_z + 1 . \quad (3.16)$$

Pored toga, uočava se da je:

$$k_x^{min} = k_y^{min} = 0 ; \quad k_z^{min} \equiv k_z(\mu = 1) = \frac{\pi}{a} \frac{1}{N_z + 2} > 0 , \quad (3.17)$$

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

$$k_x^{max} = k_y^{max} = \frac{\pi}{a} ; \quad k_z^{max} \equiv k_z(\mu = N_z + 1) = \frac{\pi}{a} \frac{N_z + 1}{N_z + 2} < \frac{\pi}{a} . \quad (3.18)$$

Između minimalne i maksimalne vrednosti za k_z , pa prema tome i za $\mathcal{E}_\mu(\vec{k})$, postoji još $N_z - 1$ diskretnih vrednosti¹³.

Upoređujući ove rezultate sa odgovarajućim, dobijenim za idealne beskonačne strukture, 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:

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

odnosno, pošto je $\Omega_\alpha \equiv \sqrt{C_\alpha/M} = v/a$:

$$\omega_\alpha^{min}(k_{min}) = 2 \frac{v}{a} \sin \left[\frac{\pi}{2(N_z + 2)} \right] \neq 0 . \quad (3.19)$$

¹³Ukupan broj mogućih vrednosti kvaziimpulsa k_z jednak je broju energijskih i dvodimenzionalih podzona: $N_z + 1$.

To znači da fononi u tankim filmovima poseduju „donji“ energijski gep:

$$\Delta_1 \equiv \Delta_{min} = \hbar \omega_{min}^\alpha = E_{min}^f - E_{min}^b = 2 E_0 \sin \left[\frac{\pi}{2(N_z + 2)} \right] \quad (3.20)$$

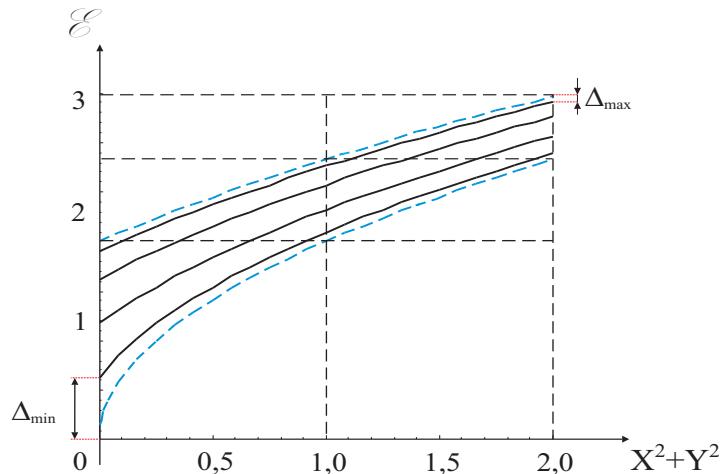
i „gornji“ energijski gep:

$$\Delta_2 \equiv \Delta_{max} = \hbar \omega_{max}^\alpha = \left(E_{max}^b - E_{max}^f \right)_{k_x=k_y=0} = 2 E_0 \left[1 - \sin \left(\frac{\pi}{2} \frac{N_z + 1}{N_z + 2} \right) \right], \quad (3.21)$$

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

$$\mathcal{W}_f = \mathcal{W}_b - (\Delta_1 + \Delta_2) = 2 E_0 \sin \left(\frac{\pi}{2} \frac{N_z + 1}{N_z + 2} \right) \quad (3.22)$$

(indeks f označava film, a b neograničenu strukturu). Na osnovu ovih rezultata zakon disperzije (3.15) grafički je prikazan na slici 3.3 i to: za idealne beskonačne strukture (2.19) – isprekidanim linijama, između kojih je on kontinualan, i za ultratanki film – punim linijama.



Slika 3.3: Fononski spektar $\mathcal{E} = \mathcal{E}_\mu(\mathcal{R}_{xy})$

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

3.4 Gustina fononskih stanja

U cilju određivanja gustine fononskih stanja, unutrašnje energije i toplotne kapacitivnosti tankog kristalnog filma primenićemo isti rezon koji je sproveden prilikom termodinamičke analize neograničenih sistema (odeljak 2.5). U tu svrhu moramo najpre redefinisati Debajevu frekvenciju (ω_D^f) i njoj korespondirajući talasni vektor (k_D^f) za slučaj opisanog modela filma.

Translaciona simetrija filma narušena je duž z -pravca, te je:

$$k_{x/y} \in \left[-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a} \right] \Rightarrow \Delta k_x = \Delta k_y = \frac{2\pi}{a},$$

$$k_z \in \left[\frac{1}{N_z + 2} \cdot \frac{\pi}{a}, \frac{N_z + 1}{N_z + 2} \cdot \frac{\pi}{a} \right] \Rightarrow \Delta k_z = \frac{N_z}{N_z + 2} \cdot \frac{\pi}{a}.$$

Sada je:

$$V = \left\{ \frac{\frac{4}{3} \pi (ak_D^f)^3}{a^3 \Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z} \right\} \Rightarrow k_D^f = \frac{\sqrt[3]{3\pi^2}}{a} \cdot \sqrt[3]{\frac{N_z}{N_z + 2}}$$

i konačno:

$$k_D^f = k_D^b \cdot \sqrt[3]{\frac{N_z}{2(N_z + 2)}}, \quad (3.23)$$

gde je k_D^b definisano relacijom (2.30). Odavde sledi da je:

$$\frac{k_D^f}{k_D^b} = \sqrt[3]{\frac{N_z}{2(N_z + 2)}} < 1, \quad \text{odnosno: } k_D^f < k_D^b.$$

Gustina fononskih stanja u filmu iznosi:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_D^f(\omega) &= \frac{3N_x N_y N_z^f a^3}{(2\pi)^3} \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{k_{min}}^{k_D^f} k^2 dk \delta(\omega - vk) = \frac{3N_x N_y N_z^f a^3}{2\pi^2} \cdot \frac{\omega^2}{v^3} \Rightarrow \\ &\Rightarrow \mathcal{D}_D^f(\omega) = \frac{N_x N_y N_z^f a^3}{2\pi^2} \cdot \frac{\omega^2}{v^3}, \end{aligned} \quad (3.24)$$

a Debajeva frekvencija se određuje iz uslova normiranja:

$$\int_{\omega_{min}}^{\omega_D^f} \mathcal{D}_D^f(\omega) d\omega = N \Rightarrow \frac{N_x N_y N_z^f a^3}{2\pi^2 v^3} \int_{\omega_{min}}^{\omega_D^f} \omega^2 d\omega = N_x N_y (N_z^f + 1),$$

odakle, uzimajući u obzir jednačine (2.29) i (3.19), sledi:

$$\begin{aligned} \omega_D^f &= \frac{\sqrt[3]{6\pi^2}}{a} v \cdot \sqrt[3]{\frac{N_z^f + 1}{N_z^f} + \frac{4}{3\pi^2} \cdot \sin^3 \frac{\pi}{2(N_z^f + 2)}} = \\ &= \omega_D^b \cdot \sqrt[3]{\frac{N_z^f + 1}{N_z^f} + \frac{4}{3\pi^2} \cdot \sin^3 \frac{\pi}{2(N_z^f + 2)}}, \end{aligned} \quad (3.25)$$

odnosno:

$$\frac{\omega_D^f}{\omega_D^b} = \sqrt[3]{\frac{N_z^f + 1}{N_z^f} + \frac{4}{3\pi^2} \cdot \sin^3 \frac{\pi}{2(N_z^f + 2)}} > 1. \quad (3.26)$$

Dakle, Debajeva frekvencija u tankom kristalnom filmu ima nešto višu vrednost u odnosu na neograničenu kristalnu strukturu. Na primer, za dvoslojni tanki film ($N_z^f = 2$) je $\omega_D^f = 1,147 \cdot \omega_D^b$, dok se u limesu $N_z^f \rightarrow \infty$ dobija da $\omega_D^f \rightarrow \omega_D^b$, što je i očekivan rezultat.

Traženjem odnosa gustine fononskih stanja u idealnoj i film-strukturi, i to upravo na Debajevim frekvencijama:

$$\frac{\mathcal{D}_D^f(\omega_D^f)}{\mathcal{D}_D^b(\omega_D^b)} = \frac{N_z^f}{N_z^b} \cdot \left(\frac{\omega_D^f}{\omega_D^b} \right)^2 = \frac{N_z^f}{N_z^b} \cdot \left(\frac{N_z^f + 1}{N_z^f} + \frac{4}{3\pi^2} \cdot \sin^3 \frac{\pi}{2(N_z^f + 2)} \right)^{\frac{2}{3}}, \quad (3.27)$$

dobija se da je populacija fonona u filmu mnogo manja nego u odgovarajućoj idealnoj strukturi, tj.

$$\mathcal{D}_D^f(\omega_D^f) \ll \mathcal{D}_D^b(\omega_D^b), \quad (3.28)$$

jer je $N_z^b \sim 10^8$, a $N_z^f \sim 10$. Naravno, ovo važi uz pretpostavku da je brzina zvuka u obe sredine ista, tj. da je $v_b \approx v_f$.

Kako su fononi sa Debajevim frekvencijama odgovorni za električno i toplotno transportna svojstva materijala, iz izraza (3.26) i (3.27) sledi da će film struktura biti slabiji električni ($\sigma_f < \sigma_b$) i toplotni ($C_f < C_b$) provodnik od odgovarajućih masivnih struktura, ukoliko među njima nema hemijskih, odnosno strukturnih razlika.

3.5 Termodinamika filma

Unutrašnja energija tankog kristalnog filma izračunava se pomoću jednačine:

$$U_f = \int d\omega_f \mathcal{D}(\omega_f) \langle n(\omega_f, T) \rangle \hbar \omega_f = \int_{\omega_{min}^f}^{\omega_D^f} d\omega_f \frac{(\omega_f)^2 V}{2\pi^2 v^3} \left(\frac{\hbar \omega_f}{e^{\frac{\hbar \omega_f}{k_B T}} - 1} \right),$$

iz koje se – na isti način kao što je to učinjeno za neograničene kristalne strukture – dobija da je:

$$U_f = 9N_f k_B T \left(\frac{T}{T_D^f} \right)^3 \int_{x_{min}^f}^{x_D^f} \frac{x_f^3}{e^{x_f} - 1} dx_f, \quad (3.29)$$

gde je: $N_f = N_x N_y (N_z + 1)$, $x_f = \frac{\hbar \omega_f}{k_B T}$, $x_D^f = \frac{\hbar \omega_D^f}{k_B T} = \frac{T_D^f}{T}$, $T_D^f = \frac{\hbar \omega_D^f}{k_B}$ i $x_{min}^f = \frac{\hbar \omega_{min}^f}{k_B T}$. U slučaju visokih temperatura:

$$T \gg T_D^f = \frac{\hbar v}{k_B a} \sqrt[3]{6\pi^2} \sqrt[3]{\frac{N_z^f + 1}{N_z^f} + \frac{4}{3\pi^2} \cdot \sin^3 \frac{\pi}{2(N_z^f + 2)}}$$

sledi:

$$\begin{aligned} U_f &= 3N_f k_B T \left(\frac{T}{T_D^f} \right)^3 \left[(x_D^f)^3 - (x_{min}^f)^3 \right] = 3N_f k_B T \left[1 - \left(\frac{\hbar \omega_{min}^f}{k_B T_D^f} \right)^3 \right] = \\ &= 3N_f k_B T \left[1 - \left(\frac{\omega_{min}^f}{\omega_D^f} \right)^3 \right], \end{aligned} \quad (3.30)$$

odnosno, na osnovu (3.19) i (3.25):

$$U_f = 3N_f k_B T \left\{ 1 - \left[1 + \frac{3\pi^2}{4 \sin^3 \frac{\pi}{2(N_z^f + 2)}} \cdot \frac{N_z^f + 1}{N_z^f} \right]^{-1} \right\}. \quad (3.31)$$

Toplotna kapacitivnost filma se određuje diferenciranjem ovog izraza po temperaturi:

$$C_f = \frac{\partial U_f}{\partial T} = 3N_f k_B \left\{ 1 - \left[1 + \frac{3\pi^2}{4 \sin^3 \frac{\pi}{2(N_z^f + 2)}} \cdot \frac{N_z^f + 1}{N_z^f} \right]^{-1} \right\}, \quad (3.32)$$

a toplotna kapacitivnost obračunata po jednoj elementarnoj celiji kristala iznosi:

$$C_f^* = \frac{1}{N_f} \frac{\partial U}{\partial T} = 3k_B \left\{ 1 - \left[1 + \frac{3\pi^2}{4 \sin^3 \frac{\pi}{2(N_z^f + 2)}} \cdot \frac{N_z^f + 1}{N_z^f} \right]^{-1} \right\}. \quad (3.33)$$

Analizom dobijenog rezultata i njegovim upoređivanjem sa odgovarajućim za balk-strukture (2.34) zaključuje se da toplotna kapacitivnost tankog filma u visokotemperaturskoj oblasti ima nešto nižu vrednost od one u neograničenim kristalnim sistemima. Na primer, u slučaju dvoslojnog filma ($N_z = 2$) se dobija da je:

$$C_f^* = 0,995 \cdot C_b^*.$$

U granicama niskih temperatura, kada $x_D^f \rightarrow \infty$, izraz za unutrašnju energiju postaje:

$$U_f = 9N_f k_B T \left(\frac{T}{T_D^f} \right)^3 \int_{x_{min}^f}^{\infty} \frac{x_f^3}{e^{x_f} - 1} dx_f,$$

što se – uzimajući u obzir osobine određenih integrala – može napisati u obliku:

$$U_f = 9N_f k_B T \left(\frac{T}{T_D^f} \right)^3 \left[\int_0^{\infty} \frac{x_f^3}{e^{x_f} - 1} dx_f - \int_0^{x_{min}^f} \frac{x_f^3}{e^{x_f} - 1} dx_f \right]. \quad (3.34)$$

Prvi integral sa desne strane ima rešenje [55–57]:

$$\int_0^{\infty} \frac{x_f^3}{e^{x_f} - 1} dx_f = \frac{\pi^4}{15},$$

dok se drugi rešava razvojem podintegralne funkcije u red:

$$(e^t - 1)^{-1} = \sum_{j=1}^{\infty} e^{-jt},$$

tako da (3.34) dobija oblik:

$$U_f = 9N_f k_B T \left(\frac{T}{T_D^f} \right)^3 \left[\frac{\pi^4}{15} - \sum_{j=1}^{\infty} \int_0^{x_{min}^f} x_f^3 \cdot e^{-jx_f} dx_f \right]. \quad (3.35)$$

Integral iz ove relacije se rešava višestrukom parcijalnom integracijom, nakon čega se dobija:

$$U_f = 9N_f k_B \frac{T^4}{(T_D^f)^3} \left\{ \frac{\pi^4}{15} + \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{j} e^{-jx_{min}^f} \left[(x_{min}^f)^3 + \frac{3}{j} (x_{min}^f)^2 + \frac{6}{j^2} x_{min}^f + \frac{6}{j^3} \right] - \sum_{j=1}^{\infty} \frac{6}{j^4} \right\}. \quad (3.36)$$

Toplotna kapacitivnost obračunata po jednoj elementarnoj celiji kristala iznosi:

$$\begin{aligned} C_f^* &= \frac{1}{N_f} \frac{\partial U_f}{\partial T} = \frac{12\pi^4}{5} k_B \left(\frac{T}{T_D^f} \right)^3 + 9k_B \left(\frac{T}{T_D^f} \right)^3 \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{j} e^{-j x_{min}^f} \cdot \left[\frac{1}{j} (x_{min}^f)^4 + \right. \\ &\quad \left. + \left(1 + \frac{3}{j^2} \right) (x_{min}^f)^3 + \frac{6}{j} \left(1 + \frac{1}{j^2} \right) (x_{min}^f)^2 + \frac{6}{j^2} \left(3 + \frac{1}{j^2} \right) x_{min}^f + \frac{24}{j^3} \right]. \end{aligned} \quad (3.37)$$

Uvodimo sledeće smene:

$$\frac{T}{T_D^b} \equiv \mathcal{T}, \quad \frac{\omega_{min}^f}{\omega_D^b} \equiv \Delta_f, \quad \frac{\omega_D^f}{\omega_D^b} = \sqrt[3]{\frac{N_z^f + 1}{N_z^f} + \frac{4}{3\pi^2} \cdot \sin^3 \frac{\pi}{2(N_z^f + 2)}} \equiv f(N_z)$$

na osnovu čega se može pisati:

$$\frac{T}{T_D^f} = \frac{\omega_D^b}{\omega_D^f} \cdot \mathcal{T} = \frac{\mathcal{T}}{f(N_z)}, \quad x_{min}^f = \frac{T_D^f}{T} \cdot \frac{\omega_{min}^f}{\omega_D^f} = \frac{\Delta_f}{\mathcal{T}},$$

tako da jednačina (3.37) dobija oblik:

$$\begin{aligned} C_f^* &= \frac{12\pi^4}{5} k_B \frac{\mathcal{T}^3}{f^3(N_z)} + 9k_B \frac{1}{f^3(N_z)} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{j} e^{-j \frac{\Delta_f}{\mathcal{T}}} \cdot \left[\frac{1}{j} \frac{\Delta_f^4}{\mathcal{T}} + \left(1 + \frac{3}{j^2} \right) \Delta_f^3 + \right. \\ &\quad \left. + \frac{6}{j} \left(1 + \frac{1}{j^2} \right) \Delta_f^2 \mathcal{T} + \frac{6}{j^2} \left(3 + \frac{1}{j^2} \right) \Delta_f \mathcal{T}^2 + \frac{24}{j^3} \mathcal{T}^3 \right]. \end{aligned} \quad (3.38)$$

Uvođenjem bezdimenzionog parametra $\mathcal{C}_f = \frac{C_f^*}{C_0}$, gde je $C_0 = \frac{12\pi^4}{5} k_B$, prethodna jednačina se svodi na:

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_f &= \frac{\mathcal{T}^3}{f^3(N_z)} + \frac{15}{4\pi^4} \frac{1}{f^3(N_z)} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{j} e^{-j \frac{\Delta_f}{\mathcal{T}}} \cdot \left[\frac{1}{j} \frac{\Delta_f^4}{\mathcal{T}} + \left(1 + \frac{3}{j^2} \right) \Delta_f^3 + \right. \\ &\quad \left. + \frac{6}{j} \left(1 + \frac{1}{j^2} \right) \Delta_f^2 \mathcal{T} + \frac{6}{j^2} \left(3 + \frac{1}{j^2} \right) \Delta_f \mathcal{T}^2 + \frac{24}{j^3} \mathcal{T}^3 \right], \end{aligned} \quad (3.39)$$

što se može izraziti preko tzv. Dajsonovih funkcija:

$$Z_r(x) = \sum_{j=1}^{\infty} j^{-r} e^{-j x}$$

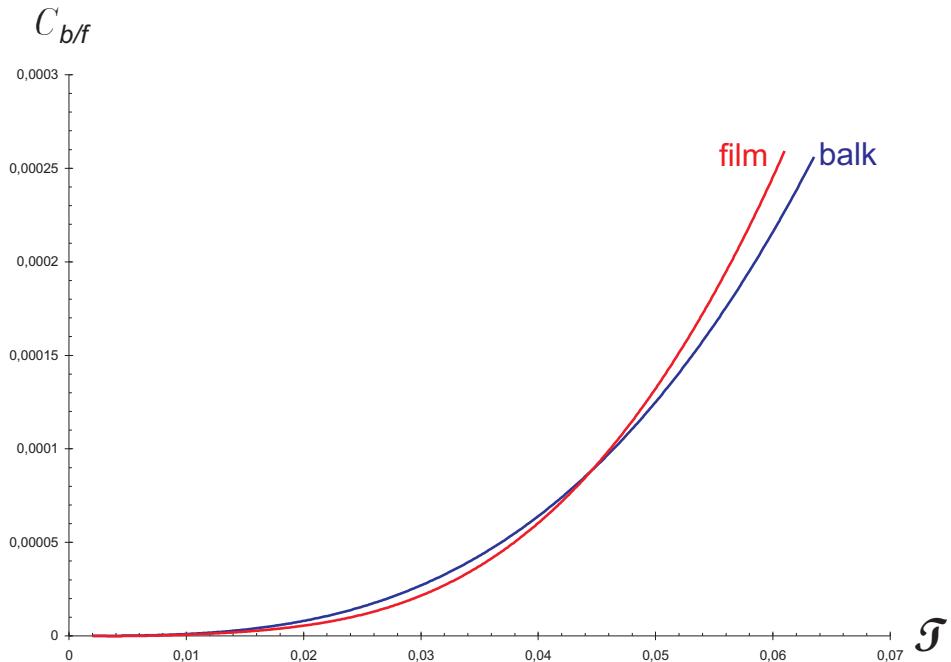
na sledeći način:

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_f &= \frac{\mathcal{T}^3}{f^3(N_z)} + \frac{15}{4\pi^4} \frac{1}{f^3(N_z)} \left\{ \frac{\Delta_f^4}{\mathcal{T}} \cdot Z_2 \left(\frac{\Delta_f}{\mathcal{T}} \right) + \Delta_f^3 \left[Z_1 \left(\frac{\Delta_f}{\mathcal{T}} \right) + 3Z_3 \left(\frac{\Delta_f}{\mathcal{T}} \right) \right] + \right. \\ &\quad + 6\Delta_f^2 \mathcal{T} \left[Z_2 \left(\frac{\Delta_f}{\mathcal{T}} \right) + Z_4 \left(\frac{\Delta_f}{\mathcal{T}} \right) \right] + 6\Delta_f^2 \mathcal{T}^2 \left[3Z_3 \left(\frac{\Delta_f}{\mathcal{T}} \right) + Z_5 \left(\frac{\Delta_f}{\mathcal{T}} \right) \right] + \\ &\quad \left. + 24\mathcal{T}^3 Z_4 \left(\frac{\Delta_f}{\mathcal{T}} \right) \right\}. \end{aligned} \quad (3.40)$$

Da bismo dobijenu zavisnost toplotne kapacitivnosti od temperature u niskotemperaturskoj oblasti prikazali grafički, uzećemo sledeće vrednosti parametara:

- brzina zvuka u kristalu: $v \approx 10^4 \text{ m/s}$;
- konstanta kristalne rešetke: $a \approx 10^{-10} \text{ m}$;
- Debajeva frekvencija u balku: $\omega_D^b \approx 4 \cdot 10^{14} \text{ rad/s}$;
- minimalna frekvencija fonona u kristalnom filmu (za $N_z = 2$): $\omega_{min}^f \approx 0,7854 \cdot 10^{14} \text{ rad/s}$.

Grafička zavisnost toplotne kapacitivnosti tankog kristalnog filma i balka od temperature prikazana je na slici 3.4.



Slika 3.4: Zavisnost toplotne kapacitivnosti od temperature u niskotemperaturskoj oblasti za balk i kristalni film

4 Fononi u superrešetkama

Superrešetke su veštački formirane strukture, periodične u jednom pravcu, sa periodom koji dvadesetak puta prevazilazi konstantu kristalne rešetke [5–9,27,40,65–66,83–84]. 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 energijskih 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 energijski 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 dobole 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 trodimenzijske zavisnosti potencijalne energije koja se intezivno menja u okviru konstante rešetke, postoji dodatna periodična jednodimenzionala zavisnost potencijalne energije koja se vrlo sporo menja na domenu konstante rešetke. Ova dodatna sporo promenjiva zavisnost uzrokuje da se dno provodne, odnosno vrh valentne zone, cepa na niz dozvoljenih podzona [5,40]. Ovako drastično odstupanje strukture provodne (valentne) zone od balkovske ima za posledicu to da se i makroskopski parametri superrešetki bitno razlikuju od balkovskih. Sporo-promenljiva 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 njihovog proučavanja.

Superrešetke se danas primenjuju za izradu [83–84]:

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

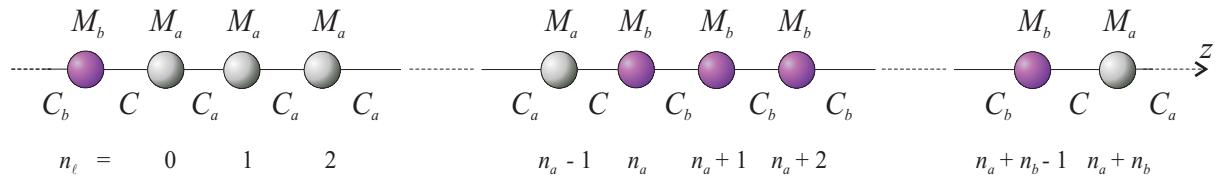
Potencijalne primene ovih struktura koje se mogu uskoro očekivati su:

- 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 [5,27,40,83–84].

U disertaciji je posmatrana 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 4.1 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 jednakе, 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 4.1: Raspođenje 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:

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

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

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

- 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 $n_\ell = 0$, $n_a - 1$, n_a i $n_a + n_b - 1$, tj.

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

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

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

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

- Zapreminski potencijal interakcije može se predstaviti u obliku:

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

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

$$V_2^Z = \sum_{\vec{n}} \sum_{n_\ell=n_a+1}^{n_a+n_b-2} \left[\frac{C_b^x}{4} \{ (u_{n_x, n_y, n_z, n_\ell} - u_{n_x+1, n_y, n_z, n_\ell})^2 + (u_{n_x, n_y, n_z, n_\ell} - u_{n_x-1, n_y, n_z, n_\ell})^2 \} + \right.$$

$$+ \frac{C_b^y}{4} \left\{ (u_{n_x, n_y, n_z, n_\ell} - u_{n_x, n_y+1, n_z, n_\ell})^2 + (u_{n_x, n_y, n_z, n_\ell} - u_{n_x, n_y-1, n_z, n_\ell})^2 \right\} + \\ + \frac{C_b^z}{4} \left\{ (u_{n_x, n_y, n_z, n_\ell} - u_{n_x, n_y, n_z, n_\ell+1})^2 + (u_{n_x, n_y, n_z, n_\ell} - u_{n_x, n_y, n_z, n_\ell-1})^2 \right\} \right]. \quad (4.12)$$

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:

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

na osnovu čega sledi:

$$e^{iN_{x/y}k_{x/y}a_{x/y}} = e^{2\pi\nu_{x/y}i}. \quad (4.14)$$

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

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

odakle se dobija:

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

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

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

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

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

4.2 Jednačine kretanja

Zakon disperzije fonona tražimo pomoću Grinove funkcije oblika:

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

na način opisan u paragrafu 2.3, tako da dobijamo:

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

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:

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

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

Preostale komutatore izračunavamo posebno za atome graničnih površina između slojeva, a posebno za atome unutar svakog sloja. Zamenom tako nađenih komutatora (uz smenu $\vec{m} \rightarrow \vec{n}$, $m_\ell \rightarrow n_\ell$) u jednačinu (4.20), dobija se:

a) $n_\ell = 0$

$$\begin{aligned} - & M_a \omega^2 G_{n_x, n_y, n_z, 0; \vec{m}, m_\ell} = -\frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{\vec{n}, \vec{m}} \delta_{0, m_\ell} - \{(2C_a^x + 2C_a^y + C_a^z + C)G_{n_x, n_y, n_z, 0; \vec{m}, m_\ell} - \\ - & C_a^x [G_{n_x+1, n_y, n_z, 0; \vec{m}, m_\ell} + G_{n_x-1, n_y, n_z, 0; \vec{m}, m_\ell}] - C_a^y [G_{n_x, n_y+1, n_z, 0; \vec{m}, m_\ell} + \\ + & G_{n_x, n_y-1, n_z, 0; \vec{m}, m_\ell}] - C_a^z G_{n_x, n_y, n_z, 1; \vec{m}, m_\ell} - CG_{n_x, n_y, n_z-1, n_a+n_b-1; \vec{m}, m_\ell}\} , \end{aligned} \quad (4.24)$$

b) $1 \leq n_\ell \leq n_a - 2$

$$\begin{aligned} - & M_a \omega^2 G_{n_x, n_y, n_z, n_\ell; \vec{m}, m_\ell} = -\frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{\vec{n}, \vec{m}} \delta_{n_\ell, m_\ell} - \{2(C_a^x + C_a^y + C_a^z)G_{n_x, n_y, n_z, n_\ell; \vec{m}, m_\ell} - \\ - & C_a^x [G_{n_x+1, n_y, n_z, n_\ell; \vec{m}, m_\ell} + G_{n_x-1, n_y, n_z, n_\ell; \vec{m}, m_\ell}] - C_a^y [G_{n_x, n_y+1, n_z, n_\ell; \vec{m}, m_\ell} + \\ + & G_{n_x, n_y-1, n_z, n_\ell; \vec{m}, m_\ell}] - C_a^z [G_{n_x, n_y, n_z, n_\ell+1; \vec{m}, m_\ell} + G_{n_x, n_y, n_z, n_\ell-1; \vec{m}, m_\ell}]\} , \end{aligned} \quad (4.25)$$

c) $n_\ell = n_a - 1$

$$\begin{aligned} - & M_a \omega^2 G_{n_x, n_y, n_z, n_a-1; \vec{m}, m_\ell} = -\frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{\vec{n}, \vec{m}} \delta_{n_a-1, m_\ell} - \{(2C_a^x + 2C_a^y + C_a^z + C) \times \\ \times & G_{n_x, n_y, n_z, n_a-1; \vec{m}, m_\ell} - C_a^x [G_{n_x+1, n_y, n_z, n_a-1; \vec{m}, m_\ell} + G_{n_x-1, n_y, n_z, n_a-1; \vec{m}, m_\ell}] - \\ - & C_a^y [G_{n_x, n_y+1, n_z, n_a-1; \vec{m}, m_\ell} + G_{n_x, n_y-1, n_z, n_a-1; \vec{m}, m_\ell}] - \\ - & C_a^z G_{n_x, n_y, n_z, n_a-2; \vec{m}, m_\ell} - CG_{n_x, n_y, n_z, n_a; \vec{m}, m_\ell}\} , \end{aligned} \quad (4.26)$$

d) $n_\ell = n_a$

$$\begin{aligned} - & M_b \omega^2 G_{n_x, n_y, n_z, n_a; \vec{m}, m_\ell} = -\frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{\vec{n}, \vec{m}} \delta_{n_a, m_\ell} - \{(2C_b^x + 2C_b^y + C_b^z + C)G_{n_x, n_y, n_z, n_a; \vec{m}, m_\ell} - \\ - & C_b^x [G_{n_x+1, n_y, n_z, n_a; \vec{m}, m_\ell} + G_{n_x-1, n_y, n_z, n_a; \vec{m}, m_\ell}] - C_b^y [G_{n_x, n_y+1, n_z, n_a; \vec{m}, m_\ell} + \\ + & G_{n_x, n_y-1, n_z, n_a; \vec{m}, m_\ell}] - C_b^z G_{n_x, n_y, n_z, n_a+1; \vec{m}, m_\ell} - CG_{n_x, n_y, n_z, n_a-1; \vec{m}, m_\ell}\} , \end{aligned} \quad (4.27)$$

e) $n_a + 1 \leq n_\ell \leq n_a + n_b - 2$

$$\begin{aligned} - & M_b \omega^2 G_{n_x, n_y, n_z, n_\ell; \vec{m}, m_\ell} = -\frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{\vec{n}, \vec{m}} \delta_{n_\ell, m_\ell} - \{2(C_b^x + C_b^y + C_b^z)G_{n_x, n_y, n_z, n_\ell; \vec{m}, m_\ell} - \\ - & C_b^x [G_{n_x+1, n_y, n_z, n_\ell; \vec{m}, m_\ell} + G_{n_x-1, n_y, n_z, n_\ell; \vec{m}, m_\ell}] - C_b^y [G_{n_x, n_y+1, n_z, n_\ell; \vec{m}, m_\ell} + \\ + & G_{n_x, n_y-1, n_z, n_\ell; \vec{m}, m_\ell}] - C_b^z [G_{n_x, n_y, n_z, n_\ell+1; \vec{m}, m_\ell} + G_{n_x, n_y, n_z, n_\ell-1; \vec{m}, m_\ell}]\} , \end{aligned} \quad (4.28)$$

f) $n_\ell = n_a + n_b - 1$

$$\begin{aligned} - & M_b \omega^2 G_{n_x, n_y, n_z, n_a+n_b-1; \vec{m}, m_\ell} = -\frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{\vec{n}, \vec{m}} \delta_{n_a+n_b-1, m_\ell} - \{(2C_b^x + 2C_b^y + C_b^z + C) \times \\ \times & G_{n_x, n_y, n_z, n_a+n_b-1; \vec{m}, m_\ell} - C_b^x [G_{n_x+1, n_y, n_z, n_a+n_b-1; \vec{m}, m_\ell} + G_{n_x-1, n_y, n_z, n_a+n_b-1; \vec{m}, m_\ell}] - \\ - & C_b^y [G_{n_x, n_y+1, n_z, n_a+n_b-1; \vec{m}, m_\ell} + G_{n_x, n_y-1, n_z, n_a+n_b-1; \vec{m}, m_\ell}] - \\ - & C_b^z G_{n_x, n_y, n_z, n_a+n_b-2; \vec{m}, m_\ell} - CG_{n_x, n_y, n_z+1, 0; \vec{m}, m_\ell}\} . \end{aligned} \quad (4.29)$$

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)

$$G_{\vec{n},n_\ell;\vec{m},m_\ell}(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} G_{n_l;m_l} e^{i[a_x k_x(n_x-m_x)+a_y k_y(n_y-m_y)+\tilde{a}(n_a+n_b)k_z(n_z-m_z)+J]} , \quad (4.30)$$

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

$$J = \begin{cases} 1. a^a k_z(n_l - m_l) & , \quad n_l - m_l < n_a \\ 2. a^a k_z(n_a - 1) + a k_z & , \quad n_l - m_l = n_a \\ 3. a^a k_z(n_a - 1) + a k_z + a^b k_z(n_l - m_l - n_a) & , \quad n_a < n_l - m_l < n_a + n_b \\ 4. a^a k_z(n_a - 1) + a^b k_z(n_b - 1) + 2 a k_z & , \quad n_l - m_l = n_a + n_b \end{cases} \quad (4.31)$$

Njenom primenom na sloj $n_\ell = 0$ dobija se da su:

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

tako da odgovarajuća jednačina kretanja (4.24) postaje:

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

odnosno,

$$\begin{aligned} & \left[\omega^2 - 4(\Omega_{a_x}^2 \sin^2 \frac{a_x k_x}{2} + \Omega_{a_y}^2 \sin^2 \frac{a_y k_y}{2}) - \Omega_{a_z}^2 - \Omega_a^2 \right] G_{0;m_\ell} + \\ & + \Omega_{a_z}^2 e^{ia^a k_z} G_{1;m_\ell} + \Omega_a^2 e^{-iak_z} G_{n_a+n_b-1;m_\ell} = \frac{i\hbar}{2\pi M_a} \delta_{0,m_\ell} , \end{aligned} \quad (4.32)$$

pri čemu su uvedene oznake:

$$\frac{C_a^{x/y/z}}{M_a} = \Omega_{a_{x/y/z}}^2 ; \quad \frac{C}{M_a} = \Omega_a^2 . \quad (4.33)$$

Ponavljajući isti postupak izračunavanja za svaki sloj i uvodeći za $n_\ell \in (n_a, n_a + n_b - 1)$ oznake analogue onima u (4.33):

$$\frac{C_b^{x/y/z}}{M_b} = \Omega_{b_{x/y/z}}^2 ; \quad \frac{C}{M_b} = \Omega_b^2 , \quad (4.34)$$

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

$$\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_\ell} + \\
 & + \Omega_{a_z}^2 e^{ia^a k_z} G_{1;m_\ell} + \Omega_a^2 e^{-iak_z} G_{n_a+n_b-1;m_\ell} = \frac{i\hbar}{2\pi M_a} \delta_{0,m_\ell} \\
 & \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}) - 2\Omega_{a_z}^2 \right] G_{1;m_\ell} + \\
 & + \Omega_{a_z}^2 e^{ia^a k_z} G_{2;m_\ell} + \Omega_{a_z}^2 e^{-ia^a k_z} G_{0;m_\ell} = \frac{i\hbar}{2\pi M_a} \delta_{1,m_\ell} \\
 & * * * \\
 & \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}) - 2\Omega_{a_z}^2 \right] G_{n_a-2;m_\ell} + \\
 & + \Omega_{a_z}^2 e^{ia^a k_z} G_{n_a-1;m_\ell} + \Omega_{a_z}^2 e^{-ia^a k_z} G_{n_a-3;m_\ell} = \frac{i\hbar}{2\pi M_a} \delta_{n_a-2,m_\ell} \\
 & \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_{n_a-1;m_\ell} + \\
 & + \Omega_a^2 e^{iak_z} G_{n_a;m_\ell} + \Omega_{a_z}^2 e^{-ia^a k_z} G_{n_a-2;m_\ell} = \frac{i\hbar}{2\pi M_a} \delta_{n_a-1,m_\ell} \quad (4.35) \\
 & \left[\omega^2 - 4(\Omega_{b_x}^2 \sin^2 \frac{a_x k_x}{2} + \Omega_{b_y}^2 \sin^2 \frac{a_y k_y}{2}) - \Omega_{b_z}^2 - \Omega_b^2 \right] G_{n_a;m_\ell} + \\
 & + \Omega_{b_z}^2 e^{ia^b k_z} G_{n_a+1;m_\ell} + \Omega_b^2 e^{-iak_z} G_{n_a-1;m_\ell} = \frac{i\hbar}{2\pi M_b} \delta_{n_a,m_\ell} \\
 & \left[\omega^2 - 4(\Omega_{b_x}^2 \sin^2 \frac{a_x k_x}{2} + \Omega_{b_y}^2 \sin^2 \frac{a_y k_y}{2}) - 2\Omega_{b_z}^2 \right] G_{n_a+1;m_\ell} + \\
 & + \Omega_{b_z}^2 e^{ia^b k_z} G_{n_a+2;m_\ell} + \Omega_{b_z}^2 e^{-ia^b k_z} G_{n_a;m_\ell} = \frac{i\hbar}{2\pi M_b} \delta_{n_a+1,m_\ell} \\
 & * * * \\
 & \left[\omega^2 - 4(\Omega_{b_x}^2 \sin^2 \frac{a_x k_x}{2} + \Omega_{b_y}^2 \sin^2 \frac{a_y k_y}{2}) - 2\Omega_{b_z}^2 \right] G_{n_a+n_b-2;m_\ell} + \\
 & + \Omega_{b_z}^2 e^{ia^b k_z} G_{n_a+n_b-1;m_\ell} + \Omega_{b_z}^2 e^{-ia^b k_z} G_{n_a+n_b-3;m_\ell} = \frac{i\hbar}{2\pi M_b} \delta_{n_a+n_b-2,m_\ell} \\
 & \left[\omega^2 - 4(\Omega_{b_x}^2 \sin^2 \frac{a_x k_x}{2} + \Omega_{b_y}^2 \sin^2 \frac{a_y k_y}{2}) - \Omega_{b_z}^2 - \Omega_b^2 \right] G_{n_a+n_b-1;m_\ell} + \\
 & + \Omega_b^2 e^{iak_z} G_{0;m_\ell} + \Omega_{b_z}^2 e^{-ia^b k_z} G_{n_a+n_b-2;m_\ell} = \frac{i\hbar}{2\pi M_b} \delta_{n_a+n_b-1,m_\ell} .
 \end{aligned}$$

Ako ovaj model pojednostavimo, svodeći ga smenama:

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

na model proste kubne rešetke i uvedemo označke:

$$\begin{aligned}
 \varrho_a &= \frac{\omega^2}{\Omega_a^2} - 4\alpha \left(\sin^2 \frac{a k_x}{2} + \sin^2 \frac{a k_y}{2} \right) - 2\alpha ; \\
 \varrho_b &= \frac{\omega^2}{\Omega_b^2} - 4\beta \left(\sin^2 \frac{a k_x}{2} + \sin^2 \frac{a k_y}{2} \right) - 2\beta , \quad (4.36)
 \end{aligned}$$

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

$$\left| \begin{array}{ccc|ccc|ccc} \varrho_a + \alpha - 1 & \alpha e^{iak_z} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e^{-iak_z} \\ \alpha e^{-iak_z} & \varrho_a & \alpha e^{iak_z} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \alpha e^{-iak_z} & \varrho_a & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline - & - & - & - & - & - & - & - & - \\ 0 & 0 & 0 & \varrho_a + \alpha - 1 & e^{iak_z} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-iak_z} & \varrho_b + \beta - 1 & \beta e^{iak_z} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \beta e^{-iak_z} & \varrho_b & 0 & 0 & 0 \\ \hline - & - & - & - & - & - & - & - & - \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\varrho_b}{\beta} e^{iak_z} & \frac{\beta}{\varrho_b} e^{iak_z} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\varrho_b}{\beta} e^{-iak_z} & \frac{\beta}{\varrho_b} e^{-iak_z} \\ e^{iak_z} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \varrho_b + \beta - 1 \end{array} \right| \mathcal{N}_{II} \quad (4.37)$$

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 (4.37) jednaka nuli [82].

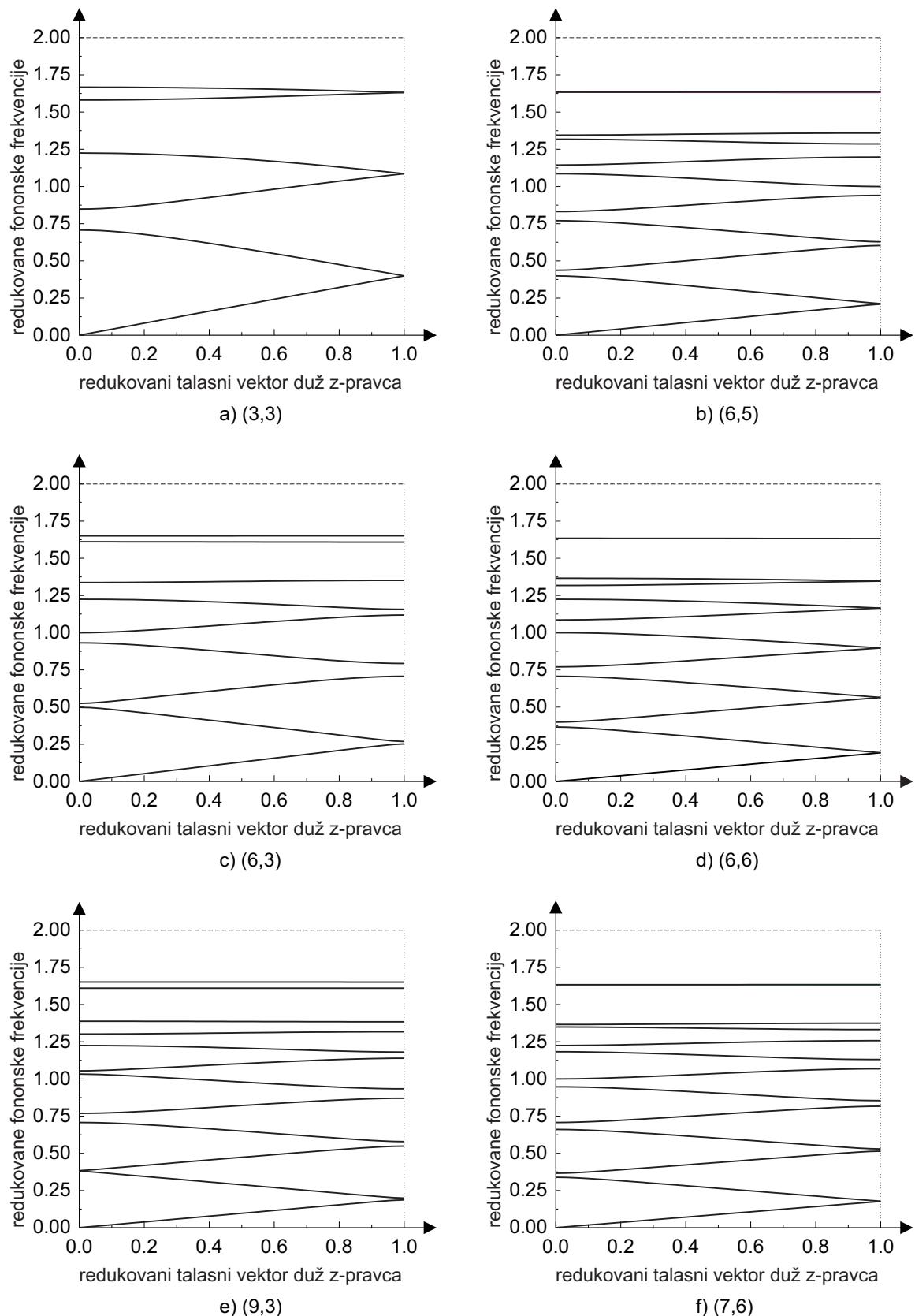
4.3 Zakon disperzije fonona

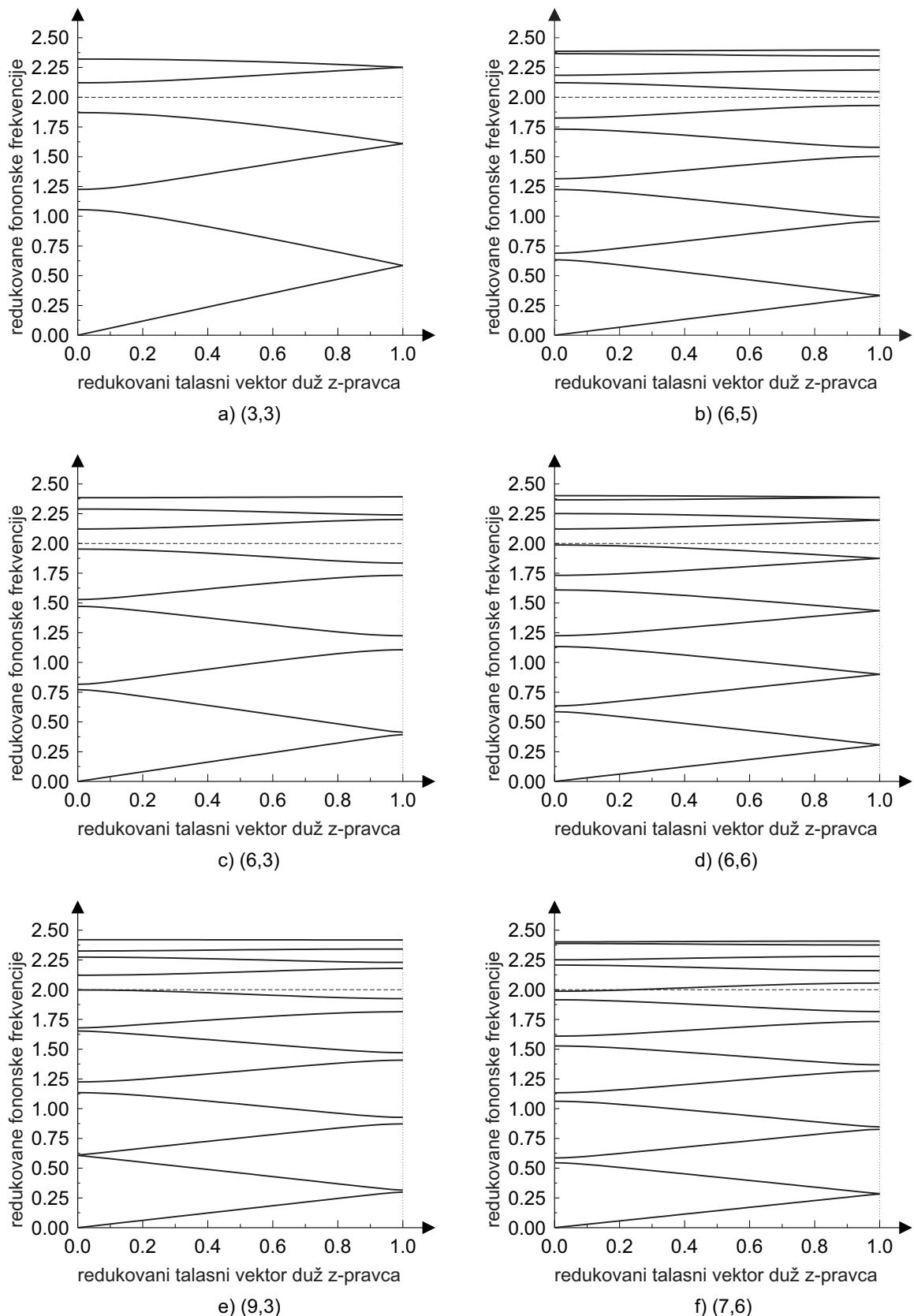
Kako je uslov $D = 0$ analitički nerešiv, ovde su izvršene numeričke analize za neke konkretnе slučajeve. Posmatrane su različite kombinacije brojeva atoma n_a i n_b , kao i promena odnosa konstanti elastičnosti između i unutar filmova. Prilikom dalje analize posmatrane su superrešetke izgrađene od filmova (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 $(\omega/\Omega)^{14}$, a na apscisama redukovani talasni vektori duž z -pravca $\tilde{a}k_z(n_a + n_b)/\pi$. Razmatran je samo centar prve Briluenove zone ($k_x = k_y = 0$). U zagradama su dati brojevi atoma u odgovarajućim slojevima: (n_a, n_b) .

¹⁴Na osnovu izraza (4.33) i (4.34), 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: $\Omega_a = \Omega_b \equiv \Omega$.

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 superrešetkama¹⁵.

- 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 energijskih 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 ($\alpha = \beta = 1,5$), energijski nivoi bivaju izbačeni iznad balkovske zone za otprilike isti iznos. Pri tome je broj disperzionih grana N izvan zone približno dat relacijama:
 - ako je $n_a + n_b$ parno $\Rightarrow N = \frac{n_a + n_b - 2}{2}$,
 - ako je $n_a + n_b$ neparno $\Rightarrow N = \frac{n_a + n_b - 3}{2}$.
- U slučaju simetrične superrešetke ($n_a = n_b$), disperzije grane se međusobno spajaju na granici prve Briluenove zone.
- Za iste vrednosti zbiru 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 izražitije pravilnosti u rasporedu i širini dozvoljenih, odnosno zabranjenih energijskih zona.

4.4 Gustina fononskih stanja

Slično kao kod filma, gustinu stanja fonona kod superrešetke tražimo u obliku:

$$\mathcal{D}_s(\omega) = 3 \frac{N_x N_y N_z}{\Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta \, d\theta \int_0^{k_{max}} k^2 \, dk \delta(\omega - \omega(k)), \quad (4.38)$$

gde je: $k_{max} = \sqrt{\frac{2}{3} k_D^2 + (k_z^{max})^2}$, a $k_z^{max} = \frac{2\pi}{a(n_a + n_b)}$ ($n_a + n_b$ je broj slojeva unutar jednog motiva). Tada je gustina stanja

$$\mathcal{D}_s(\omega) = \frac{3a^2}{\pi} \frac{N_x N_y N_z}{\Delta k_z} \frac{1}{\Omega^3 a^3} \omega^2. \quad (4.39)$$

Kako je: $\Delta k_z = 2\frac{\pi}{a} \frac{1}{n_a + n_b}$, za gustinu stanja se konačno dobija:

$$\mathcal{D}_s(\omega) = \frac{3}{2\pi^2} \frac{N_x N_y N_z (n_a + n_b)}{\Omega^3} \omega^2. \quad (4.40)$$

Iz uslova da je ukupan broj stanja jednak broju atoma:

$$3 N_x N_y N_z = \int_0^{\omega_D} \mathcal{D}_s(\omega) \, d\omega$$

¹⁵U cilju egzaktnije analize ispitano je više od 60 različitih slučajeva, a na graficima su ovde prikazani samo najkarakterističniji.

nalazi se izraz za Debajevu frekvenciju superrešetke:

$$\omega_D^s = \frac{v}{a} \sqrt[3]{\frac{6\pi^2}{n_a + n_b}}. \quad (4.41)$$

Odnos Debajevih frekvencija u superrešetki i balku jednak je:

$$\frac{\omega_D^s}{\omega_D^b} = \frac{1}{\sqrt[3]{n_a + n_b}}, \quad (4.42)$$

na osnovu čega proizilazi da je $\omega_D^s < \omega_D^b$. Odnos gustina fononskih stanja na Debajevim frekven-cijama, na osnovu (4.43) i (4.45), u superrešetki i balku je jednak:

$$\frac{\mathcal{D}_s(\omega_D^s)}{\mathcal{D}_b(\omega_D^b)} = \frac{N_z^s}{N_z^b} \sqrt[3]{n_a + n_b}, \quad (4.43)$$

odakle jasno sledi da je $\mathcal{D}_s(\omega_D^s) > \mathcal{D}_b(\omega_D^b)$. To znači da je populacija fonona sa nižim frekven-cijama u superrešetki veća, a da je debajevska oblast smanjena. U tom smislu, u strukturi se pojavljuju „mekši” fononi, ali u većem broju. Da li će oni pozitivno uticati na transportne i/ili na superprovodne karakteristike posmetrane strukture, ove analize ne mogu da dalju odgovor.

4.5 Termodinamika superrešetki

Za izabrani (linearni) zakon disperzije fonona, izraz za unutrašnju energiju sistema traži se na uobičajeni način:

$$U_s = \frac{3}{(2\pi)^3} N a^3 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta \, d\theta \int_0^{k_{max}} dk \, k^2 \frac{\hbar \Omega a k}{e^{\hbar \Omega a k / \theta} - 1}.$$

Uvođenjem oznake: $\frac{\hbar \Omega a k_{max}}{\theta} \equiv \frac{\Delta_m}{\theta}$ i višestrukom parcijalnom integracijom dobijamo:

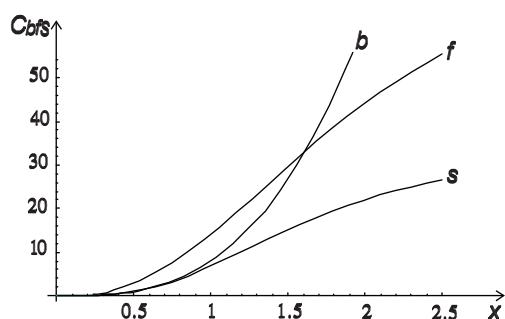
$$\begin{aligned} U_s = & \frac{3N}{2\pi^2} \theta \left\{ 6\zeta(4) \frac{\theta^3}{(\hbar \Omega)^3} - \left[a^3 k_M^3 Z_1\left(\frac{\Delta_m}{\theta}\right) + 3 \frac{\theta}{\hbar \Omega} a^2 k_M^2 Z_2\left(\frac{\Delta_m}{\theta}\right) + \right. \right. \\ & \left. \left. + 6 \left(\frac{\theta}{\hbar \Omega}\right)^2 a k_M Z_3\left(\frac{\Delta_m}{\theta}\right) + 6 \left(\frac{\theta}{\hbar \Omega}\right)^3 Z_4\left(\frac{\Delta_m}{\theta}\right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4.44)$$

Kako je $C \equiv \frac{k_B}{N} \frac{\partial U}{\partial \theta}$ i korišćenjem poznatih relacija za Dajsonove i zeta-funkcije, dobijamo izraz za toplotnu kapacitivnost superrešetke:

$$\begin{aligned} C_s = & \frac{3k_B}{2\pi^2} \left\{ a^3 k_M^3 \frac{\Delta_m}{\theta} \frac{1}{1 - e^{\Delta_m/\theta}} - 4a^3 k_M^3 Z_1\left(\frac{\Delta_m}{\theta}\right) - 12a^2 k_M^2 \frac{\theta}{\hbar \Omega} Z_2\left(\frac{\Delta_m}{\theta}\right) - \right. \\ & \left. - 24a k_M \left(\frac{\theta}{\hbar \Omega}\right)^2 Z_3\left(\frac{\Delta_m}{\theta}\right) + 24 \left(\frac{\theta}{\hbar \Omega}\right)^3 \left[\zeta(4) - Z_4\left(\frac{\Delta_m}{\theta}\right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4.45)$$

Temperatursku zavisnost toplotne kapacitivnosti određuju dva ključna člana.

- Prvi: $\sim (1 - e^{\Delta_m/\theta})^{-1}/\theta$, koji je „odgovoran” u oblasti niskih i visokih temperatura.
- Drugi, sa zeta-funkcijama, koji određuje temperatursku zavisnost u srednjetemperaturskom domenu.



Slika 4.4: Toplotne kapacitivnosti balka, filma i superrešetke

Grafička prezentacija zavisnosti relativne toplotne kapacitivnosti

$$\mathcal{C}_s \equiv \mathcal{C}_s(x) = \frac{C_s(x)}{C_0}; \quad (4.46)$$

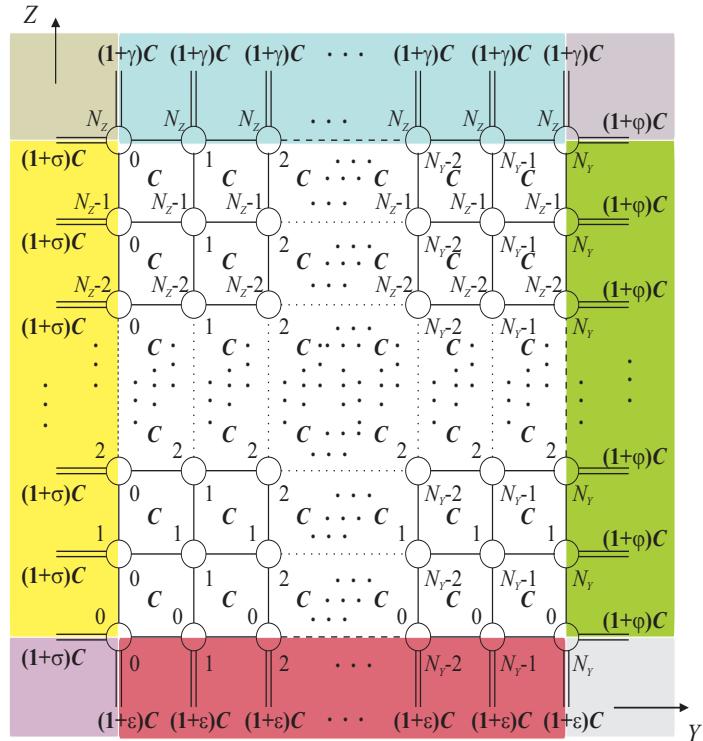
$$C_0 = \frac{k_B}{2} \left(\frac{\Delta}{E_0} \right)^3$$

od relativne temperature ($x \equiv \theta/\theta_D$) data je na slici 4.4. Radi poređenja, na istom grafiku su prikazane i ove zavisnosti za odgovarajuće film (\mathcal{C}_f) i balk (\mathcal{C}_b) strukture.

Sa grafika se može zaključiti da je u niskotemperaturskoj oblasti ponašanje toplotne kapacitivnosti superrešetke slično kao i kod film-struktura (nešto više vrednosti od balkovskih), dok je odstupanje (saturacija) znatnije u srednjotemperaturskom, a izuzetno jako u visokotemperaturskom domenu. Na osnovu toga se može zaključiti da su superrešetke u niskotemperaturskoj oblasti nešto bolji provodnici toplote od balk-struktura, ali slabiji od filmova. Suprotno, u domenu visokih temperatura superrešetke su daleko bolji toplotni izolatori (slabiji toplotni provodnici) i od film-struktura, a posebno od odgovarajućih prostorno neograničenih kristalnih struktura.

5 Fononi u kvantnim žicama

Kvantne žice predstavljaju ograničene kristalne strukture kod kojih se uslovi na granicama razlikuju od onih u unutrašnjosti [4–7, 65, 85–89], tj. translaciona simetrija narušena je duž pravaca normalnih na žicu (z i y pravci).



Slika 5.1: Poprečni presek (duž X -ravni) modela kvantne žice

Ako unutar žice (između njenih graničnih površina) nema nikakvih deformacija (narušenja) kristalne strukture (kristalna rešetka je bez primesa, vakancija i sl.), onda se ona naziva idealnom žicom [5–6]. U suprotnom, ako ove deformacije postoje (npr. kao posledice dopingovanja stranim atomima), tada se ta struktura naziva deformisanim žicom.

5.1 Model kvantne žice

Posmatra se idealna kvantna žica kubne kristalne strukture načinjena u ili na supstratu nekim tehničko-tehnološkim postupkom, čiji su osnovni kristalografski podaci (slika 5.1):

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

$$\begin{aligned} C_{\vec{n},\vec{m}}^{\alpha,\alpha} = C_{\vec{n},\vec{n}\pm\vec{\lambda}}^{\alpha} &\equiv C_{n_x n_y n_z; n_x \pm 1, n_y n_z}^{\alpha} = C_{n_x n_y n_z; n_x n_y \pm 1, n_z}^{\alpha} = \\ &= C_{n_x n_y n_z; n_x n_y n_z \pm 1}^{\alpha} \equiv C^{\alpha} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} C_{n_y 0; n_y, -1}^{\alpha} = C_{n_y, -1; n_y 0}^{\alpha} &= (1 + \varepsilon)C^{\alpha} ; & C_{n_y N_z; n_y N_z + 1}^{\alpha} = C_{n_y N_z + 1; n_y N_z}^{\alpha} &= (1 + \gamma)C^{\alpha} ; \\ C_{0 n_z; -1 n_z}^{\alpha} = C_{-1 n_z; 0 n_z}^{\alpha} &= (1 + \sigma)C^{\alpha} ; & C_{N_y n_z; N_y + 1, n_z}^{\alpha} = C_{N_y + 1, n_z; N_y n_z}^{\alpha} &= (1 + \varphi)C^{\alpha} , \end{aligned}$$

gde je $(\varepsilon, \gamma, \sigma, \varphi) \geq -1$, a $n_{y,z} \in (0, 1, 2, \dots, N_{y,z})$ su indeksi rešetke duž y i z pravaca. Na osnovu toga, o modelu se može zaključiti sledeće.

1. Kvantne žice poseduju četiri granične površine: dve paralelne XY ravnima (i to za $z = 0$ i $z = L_z = N_z a$) i dve paralelne XZ ravnima (i to za $y = 0$ i $y = L_y = N_y a$), dakle, ograničene su duž y i z pravaca i neograničene duž x pravca.
2. Duž y -ose locirano je $N_y + 1$ atoma, a duž z -ose $N_z + 1$ atoma.
3. Torzionalne konstante $C^{\alpha\beta}$ zanemarljive su u odnosu na konstante istezanja C_α .
4. Smatra se da atomi koji pripadaju graničnim slojevima prikazane kvantne žice interaguju sa spoljašnjim sredinama, bez obzira na to što duž y i z pravaca (levo od leve i desno od desne, odnosno, iznad gornje i ispod donje granične površine) nema atoma (motiva, čvorova) žice, ali su granični atomi „spregnuti” izmenjenim Hukovim silama za atome sredina - supstrata koji ih okružuju [37–41]. U skladu sa napred navedenim uslovima, konstante elastičnosti koje opisuju interakcije atoma graničnih površina sa spoljašnjim sredinama, modifikovane su odgovarajućim koeficijentima ε i γ , σ i φ .

Uzimajući u obzir sve ove uslove i činjenice da su slojevi za $n_y \leq -1$ i $n_y \geq N_y + 1$, kao i za $n_z \leq -1$ i $n_z \geq N_z + 1$ odsutni, moramo obračunati i sledeće:

$$u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} = 0 ; \quad -1 \geq n_{y,z} \wedge n_{y,z} \geq N_{y,z} + 1 ; \quad (n_{y,z} \notin [0, N_{y,z}]) .$$

S obzirom na definisani model, hamiltonijan fononskog podsistema opisane strukture 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:

$$H = T + V_{eff}^P + V_{eff}^Z , \quad (5.1)$$

gde je T – standardni kinetički član (2.9), V_{eff}^Z – član koji opisuje interakcije unutar posmatrane strukture (zapreminski potencijal interakcije):

$$\begin{aligned} V_{eff}^Z &= \sum_{\alpha;n_x} \frac{C_\alpha}{4} \sum_{n_y=2}^{N_y-2} \sum_{n_z=2}^{N_z-2} \left[(u_{\alpha;n_x+1,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,n_z})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,n_z})^2 + \right. \\ &\quad + (u_{\alpha;n_x,n_y+1,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,n_z})^2 + (u_{\alpha;n_x,n_y-1,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,n_z})^2 + \\ &\quad \left. + (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z+1} - u_{\alpha;n_x,n_y,n_z})^2 + (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z-1} - u_{\alpha;n_x,n_y,n_z})^2 \right] , \end{aligned} \quad (5.2)$$

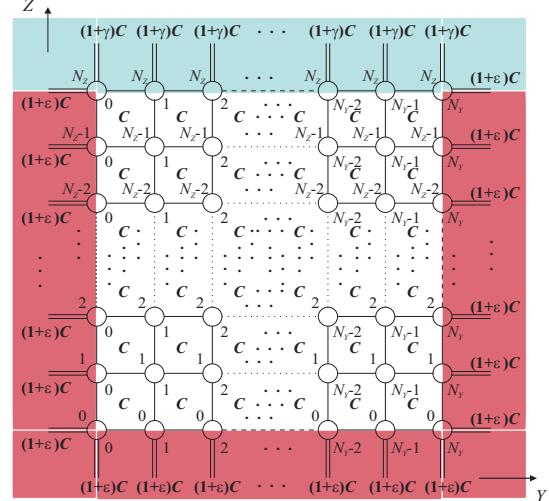
a V_{eff}^P – član koji obuhvata interakcije sa graničnim slojevima (površinski potencijal interakcije):

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

$$\begin{aligned}
& + (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+1,N_y,1} - u_{\alpha;n_x,N_y,1})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,N_y,1} - u_{\alpha;n_x,N_y,1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x+1,N_y-1,0} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,0})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,N_y-1,0} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,0})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x+1,N_y-1,1} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,1})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,N_y-1,1} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x+1,0,N_z} - u_{\alpha;n_x,0,N_z})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,0,N_z} - u_{\alpha;n_x,0,N_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x+1,0,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,0,N_z-1})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,0,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,0,N_z-1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x+1,1,N_z} - u_{\alpha;n_x,1,N_z})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,1,N_z} - u_{\alpha;n_x,1,N_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x+1,1,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,1,N_z-1})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,1,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,1,N_z-1})^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 + \\
& + (u_{\alpha;n_x+1,N_y,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,N_y,N_z-1})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,N_y,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,N_y,N_z-1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x+1,N_y-1,N_z} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,N_z})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,N_y-1,N_z} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,N_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x+1,N_y-1,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,N_z-1})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,N_y-1,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,N_z-1})^2 + \\
& + 2 (u_{\alpha;n_x,0,0} - u_{\alpha;n_x,1,0})^2 + 2 (u_{\alpha;n_x,0,0} - u_{\alpha;n_x,0,1})^2 + \\
& + 2 (u_{\alpha;n_x,0,1} - u_{\alpha;n_x,1,1})^2 + 2 (u_{\alpha;n_x,1,0} - u_{\alpha;n_x,1,1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x,0,1} - u_{\alpha;n_x,0,2})^2 + (u_{\alpha;n_x,1,0} - u_{\alpha;n_x,2,0})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x,1,1} - u_{\alpha;n_x,2,1})^2 + (u_{\alpha;n_x,1,1} - u_{\alpha;n_x,1,2})^2 + \\
& + 2 (u_{\alpha;n_x,N_y,0} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,0})^2 + 2 (u_{\alpha;n_x,N_y,0} - u_{\alpha;n_x,N_y,1})^2 + \\
& + 2 (u_{\alpha;n_x,N_y,1} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,1})^2 + 2 (u_{\alpha;n_x,N_y-1,0} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x,N_y,1} - u_{\alpha;n_x,N_y,2})^2 + (u_{\alpha;n_x,N_y-1,0} - u_{\alpha;n_x,N_y-2,0})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x,N_y-1,1} - u_{\alpha;n_x,N_y-2,1})^2 + (u_{\alpha;n_x,N_y-1,1} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,2})^2 + \\
& + 2 (u_{\alpha;n_x,0,N_z} - u_{\alpha;n_x,1,N_z})^2 + 2 (u_{\alpha;n_x,0,N_z} - u_{\alpha;n_x,0,N_z-1})^2 + \\
& + 2 (u_{\alpha;n_x,0,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,1,N_z-1})^2 + 2 (u_{\alpha;n_x,1,N_z} - u_{\alpha;n_x,1,N_z-1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x,0,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,0,N_z-2})^2 + (u_{\alpha;n_x,1,N_z} - u_{\alpha;n_x,2,N_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x,1,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,2,N_z-1})^2 + (u_{\alpha;n_x,1,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,1,N_z-2})^2 + \\
& + 2 (u_{\alpha;n_x,N_y,N_z} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,N_z})^2 + 2 (u_{\alpha;n_x,N_y,N_z} - u_{\alpha;n_x,N_y,N_z-1})^2 + \quad (5.3) \\
& + 2 (u_{\alpha;n_x,N_y,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,N_z-1})^2 + 2 (u_{\alpha;n_x,N_y-1,N_z} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,N_z-1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x,N_y,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,N_y,N_z-2})^2 + (u_{\alpha;n_x,N_y-1,N_z} - u_{\alpha;n_x,N_y-2,N_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x,N_y-1,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,N_y-2,N_z-1})^2 + (u_{\alpha;n_x,N_y-1,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,N_z-2})^2 + \\
& + \sum_{n_y=2}^{N_y-2} \left[2 (1 + \varepsilon) u_{\alpha;n_x,n_y,0}^2 + (u_{\alpha;n_x,n_y,0} - u_{\alpha;n_x,n_y,1})^2 + \right. \\
& \left. + (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 + \right. \\
& \left. + (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 + \right. \\
& \left. + (u_{\alpha;n_x+1,n_y,1} - u_{\alpha;n_x,n_y,1})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,n_y,1} - u_{\alpha;n_x,n_y,1})^2 + \right. \\
& \left. + (u_{\alpha;n_x,n_y+1,1} - u_{\alpha;n_x,n_y,1})^2 + (u_{\alpha;n_x,n_y-1,1} - u_{\alpha;n_x,n_y,1})^2 + \right. \\
& \left. + (u_{\alpha;n_x,n_y,0} - u_{\alpha;n_x,n_y,1})^2 + (u_{\alpha;n_x,n_y,1} - u_{\alpha;n_x,n_y,2})^2 + \right. \\
& \left. + 2 (1 + \gamma) u_{\alpha;n_x,n_y,N_z}^2 + (u_{\alpha;n_x,n_y,N_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,N_z-1})^2 + \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + (u_{\alpha;n_x+1,n_y,N_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,N_z})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,n_y,N_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,N_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x,n_y+1,N_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,N_z})^2 + (u_{\alpha;n_x,n_y-1,N_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,N_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x,n_y,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,n_y,N_z-2})^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,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,n_y,N_z-1})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,n_y,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,n_y,N_z-1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x,n_y+1,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,n_y,N_z-1})^2 + (u_{\alpha;n_x,n_y-1,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,n_y,N_z-1})^2 \Big] + \\
& + \sum_{n_z=2}^{N_z-2} \left[2 (1+\sigma) u_{\alpha;n_x,0,n_z}^2 + (u_{\alpha;n_x,0,n_z} - u_{\alpha;n_x,1,n_z})^2 + \right. \\
& + (u_{\alpha;n_x+1,0,n_z} - u_{\alpha;n_x,0,n_z})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,0,n_z} - u_{\alpha;n_x,0,n_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x,0,n_z+1} - u_{\alpha;n_x,0,n_z})^2 + (u_{\alpha;n_x,0,n_z-1} - u_{\alpha;n_x,0,n_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x+1,1,n_z} - u_{\alpha;n_x,1,n_z})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,1,n_z} - u_{\alpha;n_x,1,n_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x,1,n_z+1} - u_{\alpha;n_x,1,n_z})^2 + (u_{\alpha;n_x,1,n_z-1} - u_{\alpha;n_x,1,n_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x,0,n_z} - u_{\alpha;n_x,1,n_z})^2 + (u_{\alpha;n_x,1,n_z} - u_{\alpha;n_x,2,n_z})^2 + \\
& + 2 (1+\varphi) u_{\alpha;n_x,N_y,n_z}^2 + (u_{\alpha;n_x,N_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,n_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x+1,N_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,N_y,n_z})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,N_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,N_y,n_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x,N_y,n_z+1} - u_{\alpha;n_x,N_y,n_z})^2 + (u_{\alpha;n_x,N_y,n_z-1} - u_{\alpha;n_x,N_y,n_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x,N_y-1,n_z} - u_{\alpha;n_x,N_y-2,n_z})^2 + (u_{\alpha;n_x,N_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,n_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x+1,N_y-1,n_z} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,n_z})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,N_y-1,n_z} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,n_z})^2 + \\
& \left. + (u_{\alpha;n_x,N_y-1,n_z+1} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,n_z})^2 + (u_{\alpha;n_x,N_y-1,n_z-1} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,n_z})^2 \right] \Big] .
\end{aligned}$$

Imajući u vidu tehnologiju izrade kvantnih žica [1–3,85–89], ne postoji nikakav osnov za pretpostavku da će ona sa svih strana biti okružena različitim sredinama. Uprošćen, ali mnogo realniji model kvantne žice podrazumeva da se ona realizuje nekim depozicionim postupkom (ecovanje, selektivna epitaksija, rast na zakošenom supstratu, nagrizanje itd) u supstratu ili na njegovoj gornjoj graničnoj površini, u kom slučaju će atomi koji sačinjavaju kvantu žicu biti okruženi atomima koji pripadaju samo dvema različitim sredinama, kao što je prikazano na slici 5.2. Tada se površinski član hamiltoniana (5.3) svodi na ($\sigma, \varphi \rightarrow \varepsilon$):



Slika 5.2: Realni model kvantne žice

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

$$\begin{aligned}
& + (u_{\alpha;n_x+1,0,0} - u_{\alpha;n_x,0,0})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,0,0} - u_{\alpha;n_x,0,0})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x+1,0,1} - u_{\alpha;n_x,0,1})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,0,1} - u_{\alpha;n_x,0,1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x+1,1,0} - u_{\alpha;n_x,1,0})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,1,0} - u_{\alpha;n_x,1,0})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x+1,1,1} - u_{\alpha;n_x,1,1})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,1,1} - u_{\alpha;n_x,1,1})^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+1,N_y,1} - u_{\alpha;n_x,N_y,1})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,N_y,1} - u_{\alpha;n_x,N_y,1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x+1,N_y-1,0} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,0})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,N_y-1,0} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,0})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x+1,N_y-1,1} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,1})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,N_y-1,1} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x+1,0,N_z} - u_{\alpha;n_x,0,N_z})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,0,N_z} - u_{\alpha;n_x,0,N_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x+1,0,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,0,N_z-1})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,0,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,0,N_z-1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x+1,1,N_z} - u_{\alpha;n_x,1,N_z})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,1,N_z} - u_{\alpha;n_x,1,N_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x+1,1,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,1,N_z-1})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,1,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,1,N_z-1})^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 + \\
& + (u_{\alpha;n_x+1,N_y,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,N_y,N_z-1})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,N_y,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,N_y,N_z-1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x+1,N_y-1,N_z} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,N_z})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,N_y-1,N_z} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,N_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x+1,N_y-1,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,N_z-1})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,N_y-1,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,N_z-1})^2 + \\
& + 2 (u_{\alpha;n_x,0,0} - u_{\alpha;n_x,1,0})^2 + 2 (u_{\alpha;n_x,0,0} - u_{\alpha;n_x,0,1})^2 + \\
& + 2 (u_{\alpha;n_x,0,1} - u_{\alpha;n_x,1,1})^2 + 2 (u_{\alpha;n_x,1,0} - u_{\alpha;n_x,1,1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x,0,1} - u_{\alpha;n_x,0,2})^2 + (u_{\alpha;n_x,1,0} - u_{\alpha;n_x,2,0})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x,1,1} - u_{\alpha;n_x,2,1})^2 + (u_{\alpha;n_x,1,1} - u_{\alpha;n_x,1,2})^2 + \\
& + 2 (u_{\alpha;n_x,N_y,0} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,0})^2 + 2 (u_{\alpha;n_x,N_y,0} - u_{\alpha;n_x,N_y,1})^2 + \\
& + 2 (u_{\alpha;n_x,N_y,1} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,1})^2 + 2 (u_{\alpha;n_x,N_y-1,0} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x,N_y,1} - u_{\alpha;n_x,N_y,2})^2 + (u_{\alpha;n_x,N_y-1,0} - u_{\alpha;n_x,N_y-2,0})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x,N_y-1,1} - u_{\alpha;n_x,N_y-2,1})^2 + (u_{\alpha;n_x,N_y-1,1} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,2})^2 + \\
& + 2 (u_{\alpha;n_x,0,N_z} - u_{\alpha;n_x,1,N_z})^2 + 2 (u_{\alpha;n_x,0,N_z} - u_{\alpha;n_x,0,N_z-1})^2 + \\
& + 2 (u_{\alpha;n_x,0,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,1,N_z-1})^2 + 2 (u_{\alpha;n_x,1,N_z} - u_{\alpha;n_x,1,N_z-1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x,0,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,0,N_z-2})^2 + (u_{\alpha;n_x,1,N_z} - u_{\alpha;n_x,2,N_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x,1,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,2,N_z-1})^2 + (u_{\alpha;n_x,1,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,1,N_z-2})^2 + \\
& + 2 (u_{\alpha;n_x,N_y,N_z} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,N_z})^2 + 2 (u_{\alpha;n_x,N_y,N_z} - u_{\alpha;n_x,N_y,N_z-1})^2 + \quad (5.4) \\
& + 2 (u_{\alpha;n_x,N_y,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,N_z-1})^2 + 2 (u_{\alpha;n_x,N_y-1,N_z} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,N_z-1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x,N_y,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,N_y,N_z-2})^2 + (u_{\alpha;n_x,N_y-1,N_z} - u_{\alpha;n_x,N_y-2,N_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x,N_y-1,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,N_y-2,N_z-1})^2 + (u_{\alpha;n_x,N_y-1,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,N_z-2})^2 + \\
& + \sum_{n_y=2}^{N_y-2} \left[2 (1 + \varepsilon) u_{\alpha;n_x,n_y,0}^2 + (u_{\alpha;n_x,n_y,0} - u_{\alpha;n_x,n_y,1})^2 + \right. \\
& \left. + (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 + \right. \\
& \left. + (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 + \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_{n_y=2}^{N_y-2} \left[2 (1 + \varepsilon) u_{\alpha;n_x,n_y,0}^2 + (u_{\alpha;n_x,n_y,0} - u_{\alpha;n_x,n_y,1})^2 + \right. \\
& \left. + (u_{\alpha;n_x+1,n_y,0} - u_{\alpha;n_x,n_y,0})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,n_y,0} - u_{\alpha;n_x,n_y,0})^2 + \right. \\
& \left. + (u_{\alpha;n_x,n_y+1,0} - u_{\alpha;n_x,n_y,0})^2 + (u_{\alpha;n_x,n_y-1,0} - u_{\alpha;n_x,n_y,0})^2 + \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + (u_{\alpha;n_x+1,n_y,1} - u_{\alpha;n_x,n_y,1})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,n_y,1} - u_{\alpha;n_x,n_y,1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x,n_y+1,1} - u_{\alpha;n_x,n_y,1})^2 + (u_{\alpha;n_x,n_y-1,1} - u_{\alpha;n_x,n_y,1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x,n_y,0} - u_{\alpha;n_x,n_y,1})^2 + (u_{\alpha;n_x,n_y,1} - u_{\alpha;n_x,n_y,2})^2 + \\
& + 2(1+\gamma)u_{\alpha;n_x,n_y,N_z}^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,N_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,N_z})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,n_y,N_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,N_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x,n_y+1,N_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,N_z})^2 + (u_{\alpha;n_x,n_y-1,N_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,N_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x,n_y,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,n_y,N_z-2})^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,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,n_y,N_z-1})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,n_y,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,n_y,N_z-1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x,n_y+1,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,n_y,N_z-1})^2 + (u_{\alpha;n_x,n_y-1,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,n_y,N_z-1})^2 \Big] + \\
& + \sum_{n_z=2}^{N_z-2} \left[2(1+\varepsilon)u_{\alpha;n_x,0,n_z}^2 + (u_{\alpha;n_x,0,n_z} - u_{\alpha;n_x,1,n_z})^2 + \right. \\
& + (u_{\alpha;n_x+1,0,n_z} - u_{\alpha;n_x,0,n_z})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,0,n_z} - u_{\alpha;n_x,0,n_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x,0,n_z+1} - u_{\alpha;n_x,0,n_z})^2 + (u_{\alpha;n_x,0,n_z-1} - u_{\alpha;n_x,0,n_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x+1,1,n_z} - u_{\alpha;n_x,1,n_z})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,1,n_z} - u_{\alpha;n_x,1,n_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x,1,n_z+1} - u_{\alpha;n_x,1,n_z})^2 + (u_{\alpha;n_x,1,n_z-1} - u_{\alpha;n_x,1,n_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x,0,n_z} - u_{\alpha;n_x,1,n_z})^2 + (u_{\alpha;n_x,1,n_z} - u_{\alpha;n_x,2,n_z})^2 + \\
& + 2(1+\varepsilon)u_{\alpha;n_x,N_y,n_z}^2 + (u_{\alpha;n_x,N_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,n_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x+1,N_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,N_y,n_z})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,N_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,N_y,n_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x,N_y,n_z+1} - u_{\alpha;n_x,N_y,n_z})^2 + (u_{\alpha;n_x,N_y,n_z-1} - u_{\alpha;n_x,N_y,n_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x,N_y-1,n_z} - u_{\alpha;n_x,N_y-2,n_z})^2 + (u_{\alpha;n_x,N_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,n_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x+1,N_y-1,n_z} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,n_z})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,N_y-1,n_z} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,n_z})^2 + \\
& \left. + (u_{\alpha;n_x,N_y-1,n_z+1} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,n_z})^2 + (u_{\alpha;n_x,N_y-1,n_z-1} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,n_z})^2 \right] \Big].
\end{aligned}$$

5.2 Jednačine kretanja

Zakon disperzije fonona i u ovom slučaju se formira pronalaženjem Grinove funkcije:

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

pomoću jednačine kretanja:

$$-M\omega^2 G_{\vec{n},\vec{m}}^\alpha(\omega) = -\frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{\vec{n},\vec{m}} + \frac{1}{i\hbar} \langle\langle [[p_{\vec{n};\alpha}, H] | u_{\vec{m};\alpha}] \rangle\rangle_\omega. \quad (5.5)$$

Kao i kod film-struktura i ovde se moraju izračunati odgovarajući komutatori, odnosno odrediti Grinove funkcije posebno za atome graničnih slojeva, a posebno za atome iz unutrašnjosti kvantne žice. Koristeći standardne komutacione relacije za pomeraje i impulse atoma:

$$\begin{aligned}
[u_{\vec{n};\alpha}, p_{\vec{m};\beta}] &= i\hbar\delta_{\vec{n}\vec{m}}\delta_{\alpha\beta} \\
[u_{\vec{n};\alpha}, u_{\vec{m};\beta}] &= [p_{\vec{n};\alpha}, p_{\vec{m};\beta}] = 0,
\end{aligned}$$

kao i ostale neophodne osnovne definicije, izračunavaju se potrebni komutatori impulsa i hamiltonijana.

1. $m_z = 0$

- $m_y = 0$

$$\begin{aligned} [p_{\beta;m_x,0,0}, H] &= -i\hbar C_\beta [(6 + 2\varepsilon) u_{\beta;m_x,0,0} - u_{\beta;m_x+1,0,0} - \\ &\quad - u_{\beta;m_x-1,0,0} - u_{\beta;m_x,0,1} - u_{\beta;m_x,1,0}] , \end{aligned}$$

- $1 \leq m_y \leq N_y - 1$

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

- $m_y = N_y$

$$\begin{aligned} [p_{\beta;m_x,N_y,0}, H] &= -i\hbar C_\beta [(6 + 2\varepsilon) u_{\beta;m_x,N_y,0} - u_{\beta;m_x+1,N_y,0} - \\ &\quad - u_{\beta;m_x-1,N_y,0} - u_{\beta;m_x,N_y,1} - u_{\beta;m_x,N_y-1,0}] , \end{aligned}$$

2. $1 \leq m_z \leq N_z - 1$

- $m_y = 0$

$$\begin{aligned} [p_{\beta;m_x,0,m_z}, H] &= -i\hbar C_\beta [(6 + \varepsilon) u_{\beta;m_x,0,m_z} - u_{\beta;m_x,1,m_z} u_{\beta;m_x+1,0,m_z} - \\ &\quad - u_{\beta;m_x-1,0,m_z} - u_{\beta;m_x,0,m_z+1} - u_{\beta;m_x,0,m_z-1}] , \end{aligned}$$

- $1 \leq m_y \leq N_y - 1$

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

- $m_y = N_y$

$$\begin{aligned} [p_{\beta;m_x,N_y,m_z}, H] &= -i\hbar C_\beta [(6 + \varepsilon) u_{\beta;m_x,N_y,m_z} - u_{\beta;m_x,N_y-1,m_z} u_{\beta;m_x+1,N_y,m_z} - \\ &\quad - u_{\beta;m_x-1,N_y,m_z} - u_{\beta;m_x,N_y,m_z+1} - u_{\beta;m_x,N_y,m_z-1}] , \end{aligned}$$

3. $m_z = N_z$

- $m_y = 0$

$$\begin{aligned} [p_{\beta;m_x,0,N_z}, H] &= -i\hbar C_\beta [(6 + \varepsilon + \gamma) u_{\beta;m_x,0,N_z} - u_{\beta;m_x+1,0,N_z} - \\ &\quad - u_{\beta;m_x-1,0,N_z} - u_{\beta;m_x,0,N_z-1} - u_{\beta;m_x,1,N_z}] , \end{aligned}$$

- $1 \leq m_y \leq N_y - 1$

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

- $m_y = N_y$

$$\begin{aligned} [p_{\beta;m_x,N_y,N_z}, H] &= -i\hbar C_\beta [(6 + \varepsilon + \gamma) u_{\beta;m_x,N_y,N_z} - u_{\beta;m_x+1,N_y,N_z} - \\ &\quad - u_{\beta;m_x-1,N_y,N_z} - u_{\beta;m_x,N_y,N_z-1} - u_{\beta;m_x,N_y-1,N_z}] . \end{aligned}$$

Preimenovanjem $\beta \rightarrow \alpha$; $m \rightarrow n$ i zamenom nađenih komutatora u jednačinu kretanja (5.5) za Grinove funkcije

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

te primenom delimične Furijeove transformacije (samo duž x -pravca, gde je posmatrana struktura neograničena)

$$\begin{aligned} G_{n_x n_y n_z; \vec{m}}^{\alpha}(\omega) &= \frac{1}{N_x} \sum_{k_x} e^{i k_x a(n_x - m_x)} G_{n_y n_z; m_y m_z}^{\alpha}(k_x; \omega); \\ \delta_{n_x m_x} \delta_{n_y m_y} \delta_{n_z m_z} &= \frac{1}{N_x} \sum_{k_x} e^{i k_x a(n_x - m_x)} \delta_{n_y m_y} \delta_{n_z m_z}, \end{aligned}$$

dobija se sledeći sistem diferencnih jednačina:

1. $n_z = 0$

- $n_y = 0$

$$\left[\left(\frac{\omega}{\Omega_{\alpha}} \right)^2 - (6 + 2\varepsilon) + 2 \cos ak_x \right] G_{0,0} + G_{1,0} + G_{0,1} = \mathcal{K}_{0,0},$$

- $1 \leq n_y \leq N_y - 1$

$$\left[\left(\frac{\omega}{\Omega_{\alpha}} \right)^2 - (6 + \varepsilon) + 2 \cos ak_x \right] G_{n_y,0} + G_{n_y+1,0} + G_{n_y-1,0} + G_{n_y,1} = \mathcal{K}_{n_y,0},$$

- $n_y = N_y$

$$\left[\left(\frac{\omega}{\Omega_{\alpha}} \right)^2 - (6 + 2\varepsilon) + 2 \cos ak_x \right] G_{N_y,0} + G_{N_y-1,0} + G_{N_y,1} = \mathcal{K}_{N_y,0},$$

2. $1 \leq n_z \leq N_z - 1$

- $n_y = 0$

$$\left[\left(\frac{\omega}{\Omega_{\alpha}} \right)^2 - (6 + \varepsilon) + 2 \cos ak_x \right] G_{0,n_z} + G_{1,n_z} + G_{0,n_z+1} + G_{0,n_z-1} = \mathcal{K}_{0,n_z},$$

- $1 \leq n_y \leq N_y - 1$

$$\left[\left(\frac{\omega}{\Omega_{\alpha}} \right)^2 - 6 + 2 \cos ak_x \right] G_{n_y,n_z} + G_{n_y+1,n_z} + G_{n_y-1,n_z} + G_{n_y,n_z+1} + G_{n_y,n_z-1} = \mathcal{K}_{n_y,n_z}, \quad (5.6)$$

- $n_y = N_y$

$$\left[\left(\frac{\omega}{\Omega_{\alpha}} \right)^2 - (6 + \varepsilon) + 2 \cos ak_x \right] G_{N_y,n_z} + G_{N_y-1,n_z} + G_{N_y,n_z+1} + G_{N_y,n_z-1} = \mathcal{K}_{N_y,n_z},$$

3. $n_z = N_z$

- $n_y = 0$

$$\left[\left(\frac{\omega}{\Omega_{\alpha}} \right)^2 - (6 + \varepsilon + \gamma) + 2 \cos ak_x \right] G_{0,N_z} + G_{1,N_z} + G_{0,N_z-1} = \mathcal{K}_{0,N_z},$$

- $1 \leq n_y \leq N_y - 1$

$$\left[\left(\frac{\omega}{\Omega_\alpha} \right)^2 - (6 + \gamma) + 2 \cos ak_x \right] G_{n_y, N_z} + G_{n_y+1, N_z} + G_{n_y-1, N_z} + G_{n_y, N_z-1} = \mathcal{K}_{n_y, N_z} ,$$

- $n_y = N_y$

$$\left[\left(\frac{\omega}{\Omega_\alpha} \right)^2 - (6 + \varepsilon + \gamma) + 2 \cos ak_x \right] G_{N_y, N_z} + G_{N_y-1, N_z} + G_{N_y, N_z-1} = \mathcal{K}_{N_y, N_z} .$$

Ovde su:

$$G_{n_y n_z; m_y m_z}^\alpha(k_x; \omega) \equiv G_{n_y, n_z} ; \quad \mathcal{K}_{n_y n_z} = \frac{i\hbar}{2\pi C_\alpha} \delta_{n_y n_z, m_y m_z} ; \quad \Omega_\alpha^2 = \frac{C_\alpha}{M}$$

(indeksi m_y i m_z su „parazitski” pa su ovde izbačeni). Prilikom izvođenja prethodnih izraza uzeto je u obzir: $u_{\alpha; \vec{n}} = 0 \Rightarrow G_{\vec{n}, \vec{m}}^\alpha = 0$ za $\forall n_{y,z} \notin [0, N_{y,z}]$. Uvođenjem oznake:

$$\varrho = \frac{\omega^2}{\Omega_\alpha^2} - 4 \left(1 + \sin^2 \frac{ak_x}{2} \right) , \quad (5.7)$$

prethodni sistem dobija oblik:

$$1. \ n_z = 0$$

- $n_y = 0$

$$(\varrho - 2\varepsilon) G_{0,0} + G_{1,0} + G_{0,1} = \mathcal{K}_{0,0} ,$$

- $1 \leq n_y \leq N_y - 1$

$$(\varrho - \varepsilon) G_{n_y, 0} + G_{n_y+1, 0} + G_{n_y-1, 0} + G_{n_y, 1} = \mathcal{K}_{n_y, 0} ,$$

- $n_y = N_y$

$$(\varrho - 2\varepsilon) G_{N_y, 0} + G_{N_y-1, 0} + G_{N_y, 1} = \mathcal{K}_{N_y, 0} ,$$

$$2. \ 1 \leq n_z \leq N_z - 1$$

- $n_y = 0$

$$(\varrho - \varepsilon) G_{0, n_z} + G_{1, n_z} + G_{0, n_z+1} + G_{0, n_z-1} = \mathcal{K}_{0, n_z} ,$$

- $1 \leq n_y \leq N_y - 1$

$$\varrho G_{n_y, n_z} + G_{n_y+1, n_z} + G_{n_y-1, n_z} + G_{n_y, n_z+1} + G_{n_y, n_z-1} = \mathcal{K}_{n_y, n_z} , \quad (5.8)$$

- $n_y = N_y$

$$(\varrho - \varepsilon) G_{N_y, n_z} + G_{N_y-1, n_z} + G_{N_y, n_z+1} + G_{N_y, n_z-1} = \mathcal{K}_{N_y, n_z} ,$$

$$3. \ n_z = N_z$$

- $n_y = 0$

$$\left[\varrho - (\varepsilon + \gamma) \right] G_{0, N_z} + G_{1, N_z} + G_{0, N_z-1} = \mathcal{K}_{0, N_z} ,$$

- $1 \leq n_y \leq N_y - 1$

$$(\varrho - \gamma) G_{n_y, N_z} + G_{n_y+1, N_z} + G_{n_y-1, N_z} + G_{n_y, N_z-1} = \mathcal{K}_{n_y, N_z} ,$$

$$\bullet \quad n_y = N_y$$

$$[\varrho - (\varepsilon + \gamma)] G_{N_y, N_z} + G_{N_y-1, N_z} + G_{N_y, N_z-1} = \mathcal{K}_{N_y, N_z},$$

što se može napisati u kompaktnijoj formi:

$$G_{n_y-1, n_z} + \\ + G_{n_y, n_z-1} + [\varrho - \varepsilon (\delta_{n_y, 0} + \delta_{n_y, N_y} + \delta_{n_z, 0}) - \gamma \delta_{n_z, N_z}] G_{n_y, n_z} + G_{n_y, n_z+1} + \\ + G_{n_y+1, n_z} = \mathcal{K}_{n_y, n_z}, \quad (5.9)$$

koja odražava njegov dvodimenzioni karakter (posebno po n_y i posebno po n_z) i sadrži ukupno $(N_y + 1) \times (N_z + 1)$ nepoznatih Grinovih funkcija. Na osnovu opštih algebarskih stavova, jasno je da se nepoznate Grinove funkcije iz (5.9) mogu izraziti kao:

$$G_{n_y, n_z} = \frac{\mathcal{D}_{n_y, n_z}}{\mathcal{D}_{N_y+1, N_z+1}}, \quad (5.10)$$

gde \mathcal{D}_{n_y, n_z} predstavlja odgovarajuću „zamensku“ determinantu, a $\mathcal{D}_{N_y+1, N_z+1} = 2D$ kvadratnu determinantu sistema:

$$\mathcal{D}_{N_y+1, N_z+1} = \begin{vmatrix} \Re & J & O & \cdots & O & O & O \\ J & R & J & \cdots & O & O & O \\ O & J & R & \cdots & O & O & O \\ \cdot & \cdot & \cdot & \ddots & \cdot & \cdot & \cdot \\ O & O & O & \cdots & R & J & O \\ O & O & O & \cdots & J & R & J \\ O & O & O & \cdots & O & J & \Re \end{vmatrix}_{N_y+1}, \quad (5.11)$$

gde je:

$$\Re \equiv \Re_{N_z+1} = \begin{bmatrix} \varrho - 2\varepsilon & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & \varrho - \varepsilon & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \varrho - \varepsilon & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \ddots & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \varrho - \varepsilon & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & \varrho - \varepsilon & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & \varrho - (\varepsilon + \gamma) \end{bmatrix}_{N_z+1}, \quad (5.12)$$

a:

$$R \equiv R_{N_z+1} = \begin{bmatrix} \varrho - \varepsilon & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & \varrho & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \varrho & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \ddots & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \varrho & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & \varrho & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & \varrho - \gamma \end{bmatrix}_{N_z+1}, \quad (5.13)$$

J je jedinična, a O nulta kvadratna matrica (obe reda $N_z + 1$).

5.3 Spektri fonona u žici

Rešenje sistema diferencnih jednačina (5.9) potražićemo, kao i kod filmova, za slučaj slobodnih površina kada se površinske perturbacije zanemaruju, tj. $\varepsilon = \gamma = 0$. U tom slučaju je:

$$\begin{aligned} & G_{n_y-1,n_z} + \\ & + G_{n_y,n_z-1} + \varrho G_{n_y,n_z} + G_{n_y,n_z+1} + \\ & + G_{n_y+1,n_z} = \mathcal{K}_{n_y n_z}, \end{aligned} \quad (5.14)$$

i:

$$\mathcal{D}_{N_y+1,N_z+1} = \left| \begin{array}{ccccccc} R & J & O & \cdots & O & O & O \\ J & R & J & \cdots & O & O & O \\ O & J & R & \cdots & O & O & O \\ \cdot & \cdot & \cdot & \ddots & \cdot & \cdot & \cdot \\ O & O & O & \cdots & R & J & O \\ O & O & O & \cdots & J & R & J \\ O & O & O & \cdots & O & J & R \end{array} \right|_{N_y+1}, \quad (5.15)$$

pri čemu je:

$$R \equiv R_{N_z+1} = \left[\begin{array}{ccccccc} \varrho & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & \varrho & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \varrho & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \ddots & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \varrho & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & \varrho & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & \varrho \end{array} \right]_{N_z+1}. \quad (5.16)$$

U cilju određivanja fononskih energija potrebni su nam polovi Grinovih funkcija, koji se dobijaju kada iste teže beskonačnosti, što znači da mora biti:

$$\mathcal{D}_{N_y+1,N_z+1} \equiv 0. \quad (5.17)$$

Kako $\mathcal{D}_{N_y+1,N_z+1}(\varrho)$ predstavlja poznatu $2D$ determinantu sistema, ona može da se izrazi preko karakterističnih Čebiševljevih polinoma druge vrste. Uslov (5.17) se „raspada” na dva uslova:

$$D_{N_y+1} \equiv 0 ; \quad R_{N_z+1} \equiv 0 , \quad (5.18)$$

pri čemu D_{N_y+1} predstavlja „običnu” determinantu $\mathcal{D}_{N_y+1,N_z+1}$ u kojoj je R zamenjen sa ϱ i J sa 1. Rešavanjem uslova $D_{N_y+1} = 0$ dobijaju se vrednosti:

$$\varrho_\mu = -2 \cos ak_y(\mu) ; \quad k_y(\mu) = \frac{\pi}{a} \frac{\mu}{N_y + 2} ; \quad \mu = 1, 2, \dots, N_y + 1 , \quad (5.19)$$

a rešavanjem uslova $R_{N_z+1} = 0$ vrednosti:

$$\varrho_\nu = -2 \cos ak_z(\nu) ; \quad k_z(\nu) = \frac{\pi}{a} \frac{\nu}{N_z + 2} ; \quad \nu = 1, 2, \dots, N_z + 1 . \quad (5.20)$$

Poznato je [37,65–66] da je:

$$\varrho = \varrho_{\nu,\mu} = \varrho_\nu + \varrho_\mu , \quad (5.21)$$

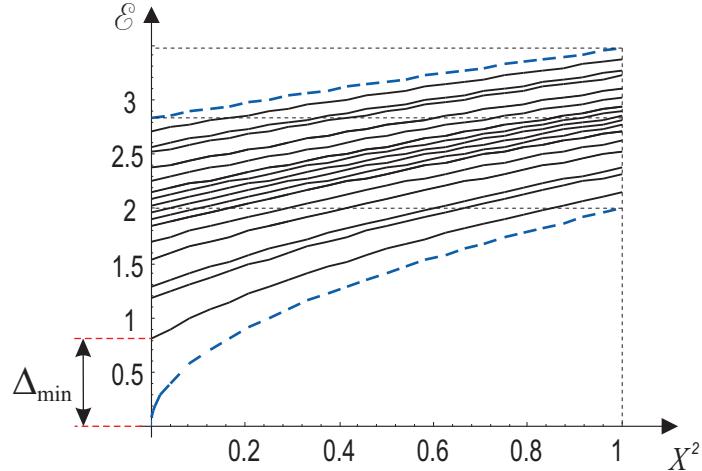
gde je:

$$\varrho = \mathcal{E}_{\vec{k}}^2 - 4 \left(1 + \sin^2 \frac{ak_x}{2} \right) ; \quad \mathcal{E}_{\vec{k}} \equiv \mathcal{E}_{\vec{k}}^\alpha = \frac{\omega}{\Omega_\alpha} . \quad (5.22)$$

Na osnovu izraza (5.19–22) dobija se zakon disperzije fonona u kvantnim žicama:

$$\mathcal{E}_{\vec{k}}^{\alpha} = 2 \sqrt{\sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y(\mu)}{2} + \sin^2 \frac{ak_z(\nu)}{2}}, \quad (5.23)$$

u istoj formi kao kod filmova (3.15) i neograničenih struktura (2.19). Međutim, vidi se da kvazi-impuls fonona u kvantnim žicama uzima diskretne vrednosti u y i z -pravcima, dok je u x -pravcu praktično kontinualan. Spektar fonona je grafički prikazan na slikama 5.3 i 5.4.



Slika 5.3: Kompletan fononski spektar $\mathcal{E} = \mathcal{E}_{\mu,\nu}(X^2)$, $X \equiv \sin(ak_x/2)$

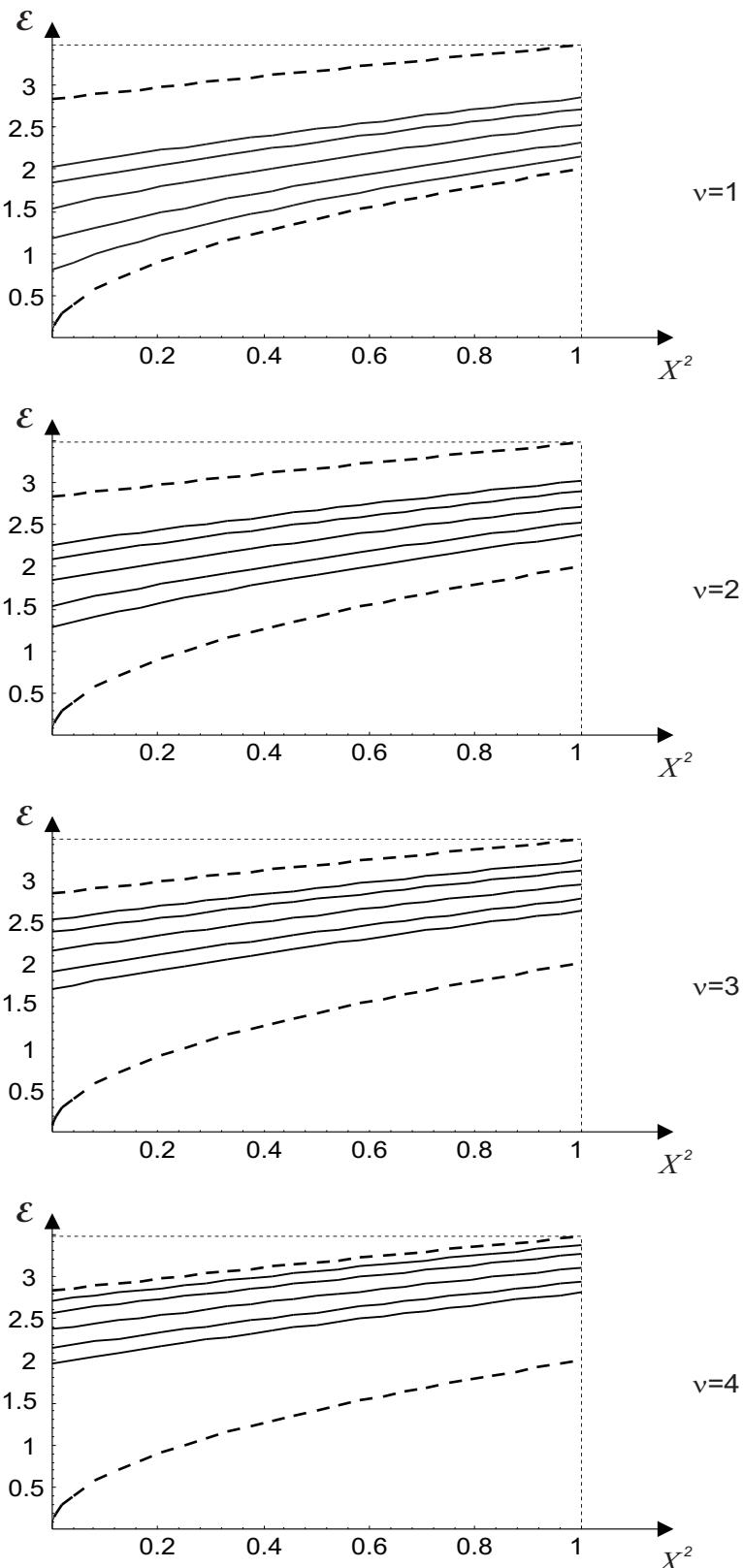
Minimalna fononska frekvencija u kvantnim žicama dobija se za $k_x \rightarrow 0$, $k_y \rightarrow k_y^{min}(\mu = 1) = \frac{\pi}{a} \frac{1}{N_y+2}$ i $k_z \rightarrow k_z^{min}(\nu = 1) = \frac{\pi}{a} \frac{1}{N_z+2}$ i iznosi:

$$\begin{aligned} \omega_{\alpha}^{min} &= 2 \Omega_{\alpha} \sqrt{\sin^2 \frac{\pi}{2(N_y+2)} + \sin^2 \frac{\pi}{2(N_z+2)}} = \\ &= 2 \frac{v}{a} \sqrt{\sin^2 \frac{\pi}{2(N_y+2)} + \sin^2 \frac{\pi}{2(N_z+2)}}. \end{aligned} \quad (5.24)$$

Takođe se uočava da je minimalna energija fonona različita od nule (kada je $k_x^{min} = 0$) i data je izrazom:

$$\Delta \equiv \Delta_{min} = \mathcal{E}_{\vec{k}_{min}}^{\alpha} = \mathcal{E}_{k_x=0, k_y=k_y^{min}, k_z=k_z^{min}}^{\alpha} = 2 \sqrt{\sin^2 \frac{ak_y^{min}(\mu)}{2} + \sin^2 \frac{ak_z^{min}(\nu)}{2}}. \quad (5.25)$$

Poređenjem izraza (3.20) i (5.25) za energijske gepove u film-strukturama i kvantnim žicama vidi se da oba zavise od dimenzija uzoraka, ali da je to kod kvantnih žica izraženije jer poseduju dva ograničenja. Sa povećanjem dimenzija uzoraka gepovi iščezavaju.



Slika 5.4: Parcijalan fononski spektar $\mathcal{E} = \mathcal{E}_{\mu,\nu}(X^2)$, $X \equiv \sin(ak_x/2)$

Slike 5.3 i 5.4 grafički prikazuju osnovne karakteristike fononskog spektra (dozvoljenih energija) u kvantnim žicama. Ako ih uporedimo sa istim u neograničenim i film-strukturama (slika 3.3) možemo jasno uočiti najbitnije razlike. Prvo, kontinualna zona dozvoljenih fononskih energija balk-struktura (na slikama 3.3, 5.3 i 5.4 ona je prikazana isprekidanim linijama) pod uticajem dveju paralelnih graničnih površina kod filma se cepta na diskretan niz kontinualnih (monoslojnih, ili dvodimenzionalih) podzona čiji je broj jednak broju atomskih slojeva između dve granične površine filma. Na slici 3.3 to je prikazano za četvoroslojni film (punim linijama) za $\nu = 1, 2, 3$ i 4. U kvantnim žicama se svaka od tih podzona (posebno za $\nu = 1$, za $\nu = 2$, pa $\nu = 3$, i za $\nu = 4$, jer je prikazana kvantna žica sa 4 monoatomska sloja duž jednog pravca ograničenja) cepta na diskretan niz kontinualnih (monolančanih, ili jednodimenzionalih) podpodzona čiji je broj jednak broju atomskih slojeva između druge dve granične površine. Na slici 5.4 to je prikazano sa po 5 punih linija, za $\mu = 1, 2, 3, 4$ i 5, dok su podzonski nivoi prikazani tankim isprekidanim linijama.

Kompletan spektar mogućih (dozvoljenih) diskretnih fononskih energija (zonskih - balkovskih i podpodzonskih - u žicama) za slučaj 5×4 slojnih kvantnih žica prikazani su na slici 5.3. Vidi se da dolazi do preklapanja nekih podpodzonskih nivoa koji pripadaju različitim energijskim podzonama.

Pored toga, primetni su dodatni energijski gepovi (za film i za žicu), koji su isključiva posledica postojanja prostornih granica. Veličina gepa za ultratanke film-strukture je određena izrazom (3.20), a za kvantne žice (5.25). Njihovim poređenjem se može zaključiti da je kod žica ovaj (donji) gep za preko 40 % veći.

5.4 Gustina fononskih stanja

Na osnovu svega što je do sada rečeno proizilazi da je kvantna žica niskodimenziona kristalna struktura unutar koje postoji dvodimenziono konfiniranje nosilaca, dok je njihovo kretanje duž trećeg pravca slobodno. U okviru opisanog modela kvantne žice uzeli smo da je njena translaciona simetrija narušena duž y i z pravaca, te je¹⁶:

$$\begin{aligned} k_x &\in \left[-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a} \right] \Rightarrow \Delta k_x = \frac{2\pi}{a}, \\ k_y &\in \left[\frac{1}{N_y + 2} \cdot \frac{\pi}{a}, \frac{N_y + 1}{N_y + 2} \cdot \frac{\pi}{a} \right] \Rightarrow \Delta k_y = \frac{N_y}{N_y + 2} \cdot \frac{\pi}{a}, \\ k_z &\in \left[\frac{1}{N_z + 2} \cdot \frac{\pi}{a}, \frac{N_z + 1}{N_z + 2} \cdot \frac{\pi}{a} \right] \Rightarrow \Delta k_z = \frac{N_z}{N_z + 2} \cdot \frac{\pi}{a}, \end{aligned}$$

na osnovu čega se dobija da je:

$$\begin{aligned} V &= \left\{ \begin{array}{l} \frac{4}{3} \pi (ak_D^w)^3 \\ a^3 \Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z \end{array} \right. \Rightarrow k_D^w = \sqrt[3]{\frac{3\pi^2}{2a^3}} \cdot \sqrt[3]{\frac{N_y}{N_y + 2} \cdot \frac{N_z}{N_z + 2}} \Rightarrow \\ &\Rightarrow k_D^w = k_D^b \cdot \sqrt[3]{\frac{N_y}{2(N_y + 2)} \cdot \frac{N_z}{2(N_z + 2)}} = k_D^f \cdot \sqrt[3]{\frac{N_y}{2(N_y + 2)}}, \end{aligned} \quad (5.26)$$

gde su k_D^b i k_D^f odgovarajuće veličine za balk i film-strukturu, definisane relacijama (2.30) i (3.23). Odavde sledi da je: $k_D^w < k_D^f < k_D^b$.

¹⁶Indeks „w“ odnosi se na kvantnu žicu, indeks „f“ na tanki kristalni film, a „b“ na neograničenu strukturu

Gustina fononskih stanja u kvantnoj žici iznosi:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_D^w(\omega) &= \frac{3N_x N_y^w N_z^w a^3}{(2\pi)^3} \int_0^\pi \sin \theta \, d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{k_{min}}^{k_D} k^2 \, dk \, \delta(\omega - vk) = \frac{3N_x N_y^w N_z^w a^3}{2\pi^2} \cdot \frac{\omega^2}{v^3} \Rightarrow \\ &\Rightarrow \mathcal{D}_D^w(\omega) = \frac{N_x N_y^w N_z^w a^3}{2\pi^2} \cdot \frac{\omega^2}{v^3}, \end{aligned} \quad (5.27)$$

a Debajeva frekvencija se određuje iz uslova:

$$\int_{\omega_{min}}^{\omega_D} \mathcal{D}_D^w(\omega) \, d\omega = N \Rightarrow \frac{N_x N_y^w N_z^w a^3}{2\pi^2 v^3} \int_{\omega_{min}}^{\omega_D} \omega^2 \, d\omega = N_x (N_y^w + 1) (N_z^w + 1),$$

gde je ω_{min} dato jednačinom (5.24). Odavde sledi:

$$\begin{aligned} \omega_D^w &= \frac{\sqrt[3]{6\pi^2}}{a} v \cdot \sqrt[3]{\frac{N_y^w + 1}{N_y^w} \cdot \frac{N_z^w + 1}{N_z^w} + \frac{4}{3\pi^2} \left[\sin^2 \frac{\pi}{2(N_y + 2)} + \sin^2 \frac{\pi}{2(N_z + 2)} \right]^{3/2}} = \\ &= \omega_D^b \cdot \sqrt[3]{\frac{N_y^w + 1}{N_y^w} \cdot \frac{N_z^w + 1}{N_z^w} + \frac{4}{3\pi^2} \left[\sin^2 \frac{\pi}{2(N_y + 2)} + \sin^2 \frac{\pi}{2(N_z + 2)} \right]^{3/2}}. \end{aligned} \quad (5.28)$$

Upoređivanjem Debajevih frekvencija za balk, ultratanki film i kvantnu žicu, može se zaključiti da je:

$$\omega_D^w > \omega_D^f > \omega_D^b.$$

Uzimajući, na primer, vrednosti $N_z^f = 2$ i $N_y^w = N_z^w = 2$, jednačine (3.26) i (5.28) daju: $\omega_D^w = 1,261 \cdot \omega_D^f = 1,446 \cdot \omega_D^b$. Dakle, Debajeva frekvencija za kvantnu žicu ima veću vrednost od onih u tankom filmu i neograničenoj kristalnoj strukturi.

Traženjem odnosa gustine fononskih stanja u idealnoj strukturi i kvantnoj žici, i to upravo na Debajevim frekvencijama:

$$\begin{aligned} \frac{\mathcal{D}_D^w(\omega_D^w)}{\mathcal{D}_D^b(\omega_D^b)} &= \frac{N_y^w N_z^w}{N_y^b N_z^b} \cdot \left(\frac{\omega_D^w}{\omega_D^b} \right)^2 = \\ &= \frac{N_y^w N_z^w}{N_y^b N_z^b} \cdot \left\{ \frac{N_y^w + 1}{N_y^w} \cdot \frac{N_z^w + 1}{N_z^w} + \frac{4}{3\pi^2} \left[\sin^2 \frac{\pi}{2(N_y + 2)} + \sin^2 \frac{\pi}{2(N_z + 2)} \right]^{3/2} \right\}^{\frac{2}{3}} \end{aligned} \quad (5.29)$$

dobija se da je:

$$\mathcal{D}_D^w(\omega_D^w) \ll \mathcal{D}_D^f(\omega_D^f) \ll \mathcal{D}_D^b(\omega_D^b),$$

odnosno, gustina fononskih stanja se drastično smanjuje pri redukciji dimenzija strukture.

5.5 Termodinamika kvantne žice

Unutrašnja energija kvantne žice izračunava se pomoću jednačine:

$$U_w = \int d\omega^w \mathcal{D}(\omega^w) \langle n(\omega^w, T) \rangle \hbar \omega^w = \int_{\omega_{min}^w}^{\omega_D^w} d\omega^w \left(\frac{(\omega^w)^2 V}{2\pi^2 v^3} \right) \left(\frac{\hbar \omega^w}{e^{\frac{\hbar \omega^w}{k_B T}} - 1} \right)$$

iz koje se – na isti način kao što je to učinjeno za neograničene kristalne strukture i tanke filmove – dobija da je:

$$U_w = 9N_w k_B T \left(\frac{T}{T_D^w} \right)^3 \int_{x_{min}^w}^{x_D^w} \frac{(x^w)^3}{e^{x^w} - 1} dx^w , \quad (5.30)$$

gde je: $N_w = N_x(N_y + 1)(N_z + 1)$, $x^w = \frac{\hbar\omega^w}{k_B T}$, $x_D^w = \frac{T_D^w}{T}$, $T_D^w = \frac{\hbar\omega_D^w}{k_B}$ i $x_{min}^w = \frac{\hbar\omega_{min}^w}{k_B T}$. U slučaju visokih temperatura:

$$T \gg T_D^w = \frac{\hbar\omega_D^w}{k_B}$$

dobija se:

$$U_w = 3N_w k_B T \left(\frac{T}{T_D^w} \right)^3 [(x_D^w)^3 - (x_{min}^w)^3] = 3N_w k_B T \left[1 - \left(\frac{\omega_{min}^w}{\omega_D^w} \right)^3 \right] ,$$

odnosno, na osnovu (5.24) i (5.28):

$$U_w = 3N_w k_B T \left\{ 1 - \left[1 + \frac{3\pi^2}{4 \left[\sin^2 \frac{\pi}{2(N_y^w + 2)} + \sin^2 \frac{\pi}{2(N_z^w + 2)} \right]^{\frac{3}{2}}} \cdot \frac{N_y^w + 1}{N_y^w} \frac{N_z^w + 1}{N_z^w} \right]^{-1} \right\} . \quad (5.31)$$

Toplotna kapacitivnost kvantne žice se određuje diferenciranjem ovog izraza po temperaturi:

$$C_w = 3N_w k_B \left\{ 1 - \left[1 + \frac{3\pi^2}{4 \left[\sin^2 \frac{\pi}{2(N_y^w + 2)} + \sin^2 \frac{\pi}{2(N_z^w + 2)} \right]^{\frac{3}{2}}} \cdot \frac{N_y^w + 1}{N_y^w} \frac{N_z^w + 1}{N_z^w} \right]^{-1} \right\} .$$

a toplotna kapacitivnost obračunata po jednoj elementarnoj ćeliji kristala iznosi:

$$C_w^* = 3k_B \left\{ 1 - \left[1 + \frac{3\pi^2}{4 \left[\sin^2 \frac{\pi}{2(N_y^w + 2)} + \sin^2 \frac{\pi}{2(N_z^w + 2)} \right]^{\frac{3}{2}}} \cdot \frac{N_y^w + 1}{N_y^w} \frac{N_z^w + 1}{N_z^w} \right]^{-1} \right\} . \quad (5.32)$$

Analizom dobijenog rezultata i njegovim upoređivanjem sa odgovarajućim za balk-strukture (2.36) i ultratanke filmove (3.33) zaključuje se da toplotna kapacitivnost kvantne žice u visokotemperaturskoj oblasti ima nešto nižu vrednost. Na primer, u slučaju kvantne žice sa $N_y = 2$ i $N_z = 2$ dobija se da je:

$$C_w^* = 0,996 \cdot C_f^* = 0,991 \cdot C_b^* .$$

U granicama niskih temperatura, kada $x_D^w \rightarrow \infty$, izraz za unutrašnju energiju (5.30) postaje:

$$U_w = 9N_w k_B T \left(\frac{T}{T_D^w} \right)^3 \int_{x_{min}^w}^{\infty} \frac{(x^w)^3}{e^{x^w} - 1} dx^w , \quad (5.33)$$

što se može napisati u obliku:

$$\begin{aligned} U_w &= 9N_w k_B T \left(\frac{T}{T_D^w} \right)^3 \left[\int_0^{\infty} \frac{(x^w)^3}{e^{x^w} - 1} dx^w - \int_0^{x_{min}^w} \frac{(x^w)^3}{e^{x^w} - 1} dx^w \right] = \\ &= 9N_w k_B T \left(\frac{T}{T_D^w} \right)^3 \left[\frac{\pi^4}{15} - \int_0^{x_{min}^w} \frac{(x^w)^3}{e^{x^w} - 1} dx^w \right]. \end{aligned} \quad (5.34)$$

Na osnovu razvoja:

$$(e^t - 1)^{-1} = \sum_{j=1}^{\infty} e^{-jt},$$

prethodna jednačina dobija oblik:

$$U_w = 9N_w k_B T \left(\frac{T}{T_D^w} \right)^3 \left[\frac{\pi^4}{15} - \sum_{j=1}^{\infty} \int_0^{x_{min}^w} x_w^3 \cdot e^{-jx_w} dx_w \right]. \quad (5.35)$$

Integral iz ove relacije se rešava višestrukom parcijalnom integracijom, nakon čega se dobija:

$$U_w = 9N_w k_B \frac{T^4}{(T_D^w)^3} \left\{ \frac{\pi^4}{15} + \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{j} e^{-jx_{min}^w} \left[(x_{min}^w)^3 + \frac{3}{j} (x_{min}^w)^2 + \frac{6}{j^2} x_{min}^w + \frac{6}{j^3} \right] - \sum_{j=1}^{\infty} \frac{6}{j^4} \right\}. \quad (5.36)$$

Toplotna kapacitivnost obračunata po jednoj elementarnoj celiji kristala iznosi:

$$\begin{aligned} C_w^* &= \frac{1}{N_w} \frac{\partial U_w}{\partial T} = \frac{12\pi^4}{5} k_B \left(\frac{T}{T_D^w} \right)^3 + 9k_B \left(\frac{T}{T_D^w} \right)^3 \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{j} e^{-jx_{min}^w} \cdot \left[\frac{1}{j} (x_{min}^w)^4 + \right. \\ &\quad \left. + \left(1 + \frac{3}{j^2} \right) (x_{min}^w)^3 + \frac{6}{j} \left(1 + \frac{1}{j^2} \right) (x_{min}^w)^2 + \frac{6}{j^2} \left(3 + \frac{1}{j^2} \right) x_{min}^w + \frac{24}{j^3} \right]. \end{aligned} \quad (5.37)$$

Uvodimo sledeće smene:

$$\frac{T}{T_D^b} \equiv \mathcal{T}, \quad \frac{\omega_{min}^w}{\omega_D^b} \equiv \Delta_w,$$

$$\omega_D^w = \sqrt[3]{\frac{N_y^w + 1}{N_y^w} \cdot \frac{N_z^w + 1}{N_z^w} + \frac{4}{3\pi^2} \left[\sin^2 \frac{\pi}{2(N_y + 2)} + \sin^2 \frac{\pi}{2(N_z + 2)} \right]^{3/2}} \equiv f(N_y, N_z)$$

na osnovu čega se može pisati:

$$\frac{T}{T_D^w} = \frac{\omega_D^b}{\omega_D^w} \cdot \mathcal{T} = \frac{\mathcal{T}}{f(N_y, N_z)}, \quad x_{min}^w = \frac{T_D^w}{T} \cdot \frac{\omega_{min}^w}{\omega_D^w} = \frac{\Delta_w}{\mathcal{T}},$$

tako da jednačina (5.37) dobija oblik:

$$\begin{aligned} C_w^* &= \frac{12\pi^4}{5} k_B \frac{\mathcal{T}^3}{f^3(N_y, N_z)} + 9k_B \frac{1}{f^3(N_y, N_z)} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{j} e^{-j\frac{\Delta_w}{\mathcal{T}}} \cdot \left[\frac{1}{j} \frac{\Delta_w^4}{\mathcal{T}} + \left(1 + \frac{3}{j^2} \right) \Delta_w^3 + \right. \\ &\quad \left. + \frac{6}{j} \left(1 + \frac{1}{j^2} \right) \Delta_w^2 \mathcal{T} + \frac{6}{j^2} \left(3 + \frac{1}{j^2} \right) \Delta_w \mathcal{T}^2 + \frac{24}{j^3} \mathcal{T}^3 \right]. \end{aligned} \quad (5.38)$$

Uvođenjem bezdimenzionog parametra $\mathcal{C}_w = \frac{C_w^*}{C_0}$, gde je $C_0 = \frac{12\pi^4}{5} k_B$, prethodna jednačina se svodi na:

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_w &= \frac{\mathcal{T}^3}{f^3(N_y, N_z)} + \frac{15}{4\pi^4} \frac{1}{f^3(N_y, N_z)} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{j} e^{-j \frac{\Delta_w}{\mathcal{T}}} \cdot \left[\frac{1}{j} \frac{\Delta_w^4}{\mathcal{T}} + \left(1 + \frac{3}{j^2}\right) \Delta_w^3 + \right. \\ &\quad \left. + \frac{6}{j} \left(1 + \frac{1}{j^2}\right) \Delta_w^2 \mathcal{T} + \frac{6}{j^2} \left(3 + \frac{1}{j^2}\right) \Delta_w \mathcal{T}^2 + \frac{24}{j^3} \mathcal{T}^3 \right], \end{aligned} \quad (5.39)$$

što se može izraziti preko tzv. Dajsonovih funkcija:

$$Z_r(x) = \sum_{j=1}^{\infty} j^{-r} e^{-jx}$$

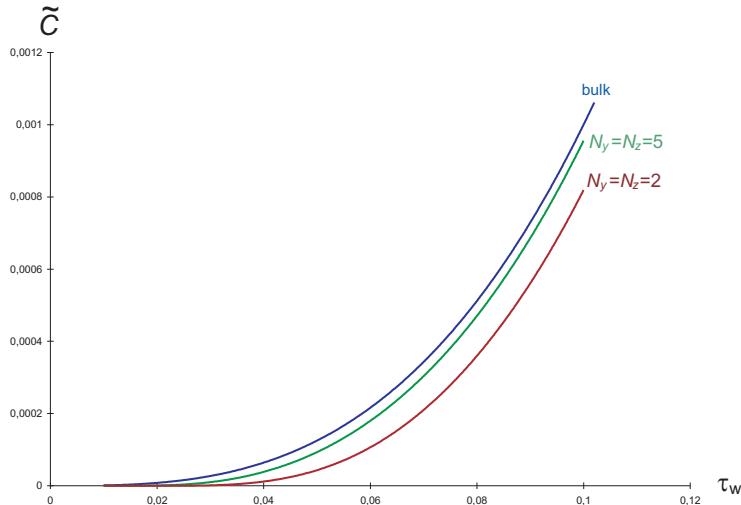
na sledeći način:

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_w &= \frac{\mathcal{T}^3}{f^3(N_y, N_z)} + \frac{15}{4\pi^4} \frac{1}{f^3(N_y, N_z)} \left\{ \frac{\Delta_w^4}{\mathcal{T}} \cdot Z_2\left(\frac{\Delta_w}{\mathcal{T}}\right) + \Delta_w^3 \left[Z_1\left(\frac{\Delta_w}{\mathcal{T}}\right) + 3Z_3\left(\frac{\Delta_w}{\mathcal{T}}\right) \right] + \right. \\ &\quad + 6\Delta_w^2 \mathcal{T} \left[Z_2\left(\frac{\Delta_w}{\mathcal{T}}\right) + Z_4\left(\frac{\Delta_w}{\mathcal{T}}\right) \right] + 6\Delta_w^2 \mathcal{T}^2 \left[3Z_3\left(\frac{\Delta_w}{\mathcal{T}}\right) + Z_5\left(\frac{\Delta_w}{\mathcal{T}}\right) \right] + \\ &\quad \left. + 24\mathcal{T}^3 Z_4\left(\frac{\Delta_w}{\mathcal{T}}\right) \right\}. \end{aligned} \quad (5.40)$$

Da bismo dobijenu zavisnost topotne kapacitivnosti od temperature u niskotemperaturskoj oblasti prikazali grafički, uzećemo sledeće vrednosti parametara:

- brzina zvuka u kristalu: $v \approx 10^4 \text{ m/s}$;
- konstanta kristalne rešetke: $a \approx 10^{-10} \text{ m}$;
- Debajeva frekvencija u balku: $\omega_D^b \approx 4 \cdot 10^{14} \text{ rad/s}$;
- minimalna frekvencija fonona u kvantnoj žici (za $N_y = N_z = 2$): $\omega_{min}^w \approx 1,0824 \cdot 10^{14} \text{ rad/s}$.

Na slici 5.5. prikazana je grafička zavisnost bezdimenzione topotne kapacitivnosti kvantne žice i balka od relativne temperature za $N_y = N_z = 2$ i $N_y = N_z = 5$.



Slika 5.5: Zavisnost topotne kapacitivnosti od temperature u niskotemperaturskoj oblasti za balk i kvantnu žicu

Vidi se da je u niskotemperaturskoj oblasti topotna kapacitivnost kvantne žice niža nego kod masivnih uzoraka, ali i da se sa povećanjem broja slojeva približava balkovskoj vrednosti.

6 Fononi u kvantnim tačkama

Kvantne tačke¹⁷ predstavljaju ograničene kristalne strukture kod kojih je kretanje nosilaca konfinirano duž sva tri kristalografska pravca: x , y i z [4–6]. Ovakvo nultodimenziono limitiranje kretanja nosilaca u kvantnim tačkama ima za posledicu kvantizaciju njihovih energijskih nivoa i dovodi do potpuno novih fizičkih pojava i osobina [85–86, 90–95]. Najspektakularnija od njih je pojava da kvantne tačke imaju veoma uzak emisioni spektar ($\sim 30\text{nm}$) i da – usled kvantnog konfiniranja – boja (talasna dužina) koju kvantna tačka emituje zavisi od njene veličine. Ova pojava našla je veoma široku primenu u biološkom obeležavanju, koje se sprovodi neuporedivo jednostavnije i efikasnije uz pomoć kvantnih tačaka (najčešće CdSe i HgS) nego sa klasičnim organskim fluorescentnim molekulima ili radioaktivnim izvorima. Na slici 6.1 prikazana je zavisnost emisionog spektra CdSe kvantne tačke od njenih dimenzija.



Slika 6.1: Zavisnost emisionog spektra CdSe kvantne tačke od njenih dimenzija

Još jednu izuzetno značajnu primenu poluprovodničke kvantne tačke našle su u tehnologiji izrade lasera [91].

6.1 Model kvantne tačke

Posmatra se idealna kvantna tačka kubne kristalne strukture načinjena u ili na supstratu nekim tehničko-tehnološkim postupkom (naparavanjem, spaterovanjem i sl.), čiji su osnovni kristalografski podaci (sl 6.2):

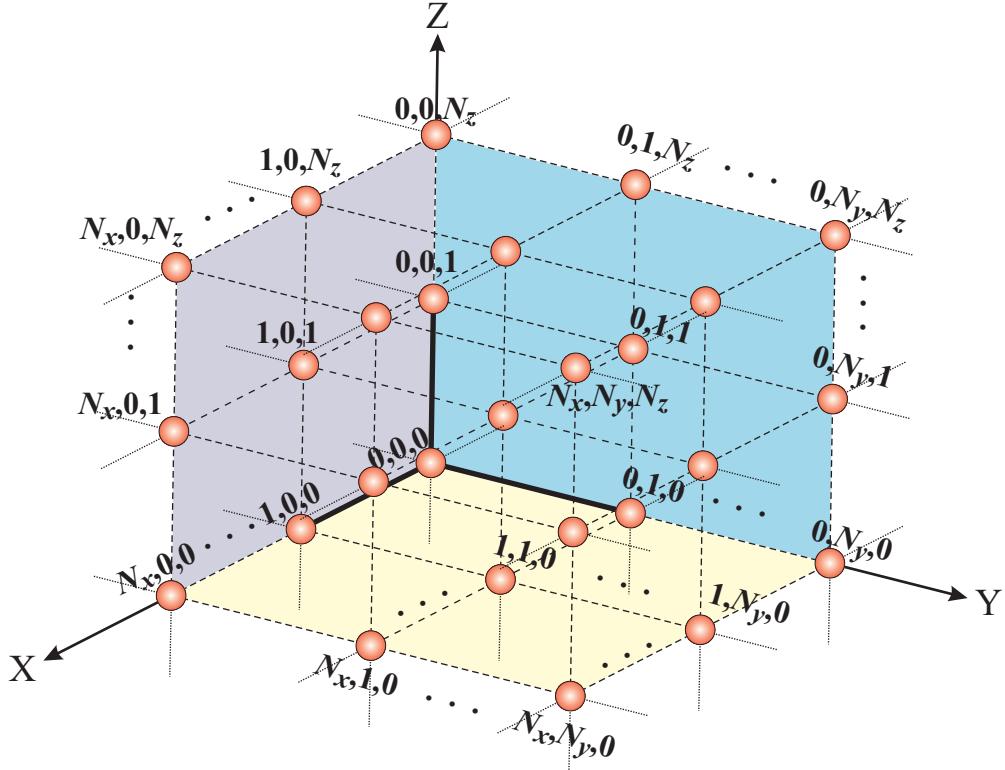
$$a_x = a_y = a_z = a \quad ; \quad N_{x,y,z} \sim 10 ;$$

$$\begin{aligned} C_{\vec{n},\vec{m}}^{\alpha,\alpha} = C_{\vec{n},\vec{n} \pm \vec{\lambda}}^{\alpha} &\equiv C_{n_x n_y n_z; n_x \pm 1, n_y n_z}^{\alpha} = C_{n_x n_y n_z; n_x n_y \pm 1, n_z}^{\alpha} = \\ &= C_{n_x n_y n_z; n_x n_y n_z \pm 1}^{\alpha} \equiv C^{\alpha}, \end{aligned}$$

¹⁷Kvantne tačke se u literaturi često nazivaju i „veštačkim atomima”.

$$\begin{aligned}
 C_{n_x, n_y, 0; n_x, n_y, -1}^{\alpha} &= C_{n_x, n_y, -1; n_x, n_y, 0}^{\alpha} = (1 + \varepsilon)C^{\alpha} \\
 C_{n_x, n_y, N_z; n_x, n_y, N_z+1}^{\alpha} &= C_{n_x, n_y, N_z+1; n_x, n_y, N_z}^{\alpha} = (1 + \gamma)C^{\alpha} \\
 C_{n_x, 0, n_z; n_x, -1, n_z}^{\alpha} &= C_{n_x, -1, n_z; n_x, 0, n_z}^{\alpha} = (1 + \sigma)C^{\alpha} \\
 C_{n_x, N_y, n_z; n_x, N_y+1, n_z}^{\alpha} &= C_{n_x, N_y+1, n_z; n_x, N_y, n_z}^{\alpha} = (1 + \varphi)C^{\alpha} \\
 C_{0, n_y, n_z; -1, n_y, n_z}^{\alpha} &= C_{-1, n_y, n_z; 0, n_y, n_z}^{\alpha} = (1 + \vartheta)C^{\alpha} \\
 C_{N_x, n_y, n_z; N_x+1, n_y, n_z}^{\alpha} &= C_{N_x+1, n_y, n_z; N_x, n_y, n_z}^{\alpha} = (1 + \phi)C^{\alpha}, \\
 (\varepsilon, \gamma, \sigma, \varphi, \vartheta, \phi) &\geq -1,
 \end{aligned}$$

gde su $n_{x,y,z}$ - indeksi rešetke duž x , y i z pravaca i $n_{x,y,z} \in (0, 1, 2, \dots, N_{x,y,z})$.



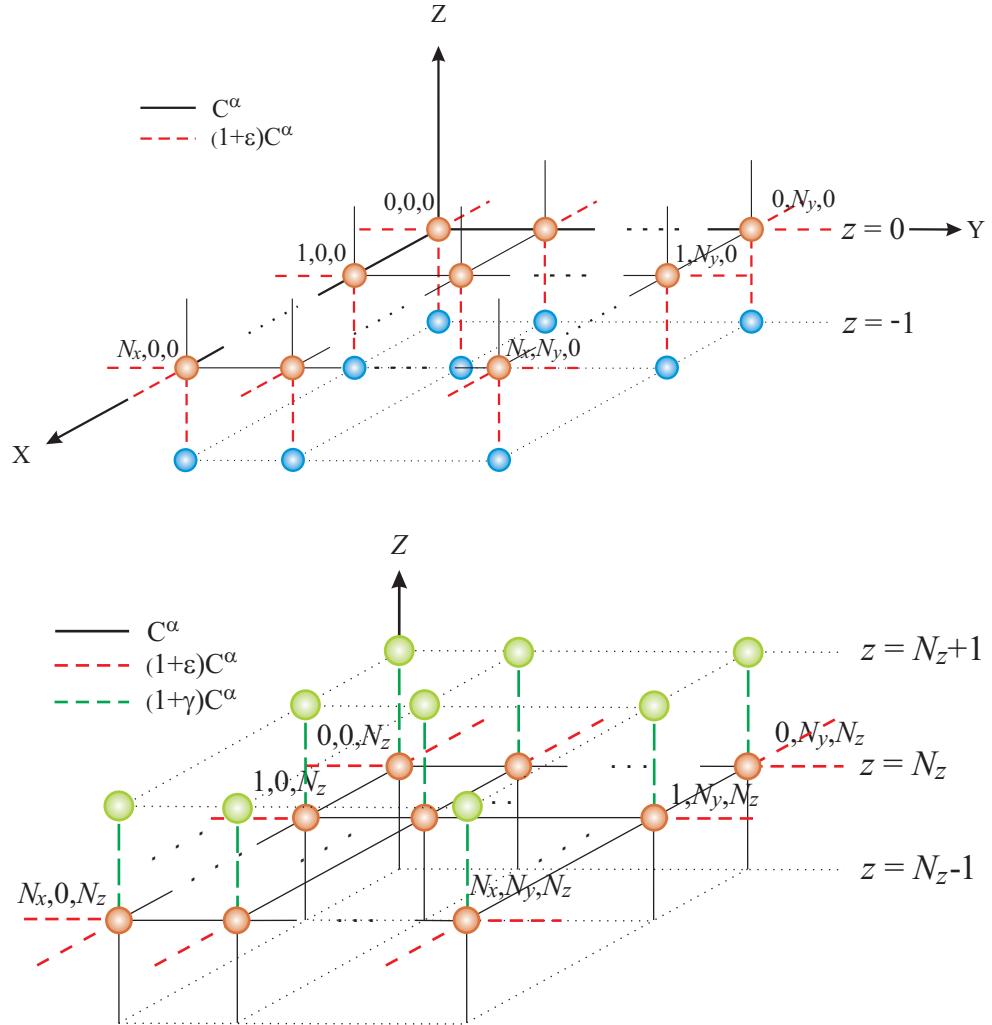
Slika 6.2: Model kvantne tačke

Na osnovu toga, o modelu se može zaključiti sledeće.

1. Kvantne tačke poseduju šest graničnih površina: dve paralelne XY ravnima (i to za $z = 0$ i $z = N_z a$), dve paralelne XZ ravnima (i to za $y = 0$ i $y = N_y a$) i dve paralelne YZ ravnima (za $x = 0$ i $x = N_x a$). Kvantne tačke su, dakle, ograničene duž sva tri kristalografska pravca x , y i z .
2. Duž x -ose locirano je $N_x + 1$ atoma, duž y -ose $N_y + 1$, a duž z -ose $N_z + 1$ atoma.
3. Torzionalne konstante $C^{\alpha\beta}$ zanemarljive su u odnosu na konstante istezanja C_{α} .
4. Smatra se da atomi, koji pripadaju graničnim slojevima prikazane kvantne tačke, interaguju sa spoljašnjim sredinama tako što su „spregnuti” izmenjenim Hukovim silama za atome sredina - supstrata koji ih okružuju [37–41]. U skladu sa napred navedenim uslovima, konstante elastičnosti koje opisuju interakcije atoma graničnih površina sa spoljašnjim sredinama, modifikovane su odgovarajućim koeficijentima $\varepsilon, \gamma, \sigma, \varphi, \vartheta$ i ϕ . Uprošćeni, ali mnogo realniji pristup koji će ovde biti sproveden, podrazumeva da su atomi koji sačinjavaju kvantu tačku okruženi atomima koji pripadaju samo dvema različitim sredinama ($\sigma, \varphi, \vartheta, \phi \rightarrow \varepsilon$), kao što je prikazano na slici 6.3.

Uzimajući u obzir sve ove uslove i činjenice da su slojevi za $n_x \leq -1$ i $n_x \geq N_x + 1$, $n_y \leq -1$ i $n_y \geq N_y + 1$, kao i za $n_z \leq -1$ i $n_z \geq N_z + 1$ odsutni, moramo obračunati i sledeće:

$$u_{\alpha; n_x, n_y, n_z} = 0 ; \quad -1 \geq n_{y,z} \wedge n_{x,y,z} \geq N_{x,y,z} + 1 ; \quad (n_{x,y,z} \notin [0, N_{x,y,z}]) .$$



Slika 6.3: Granični slojevi opisanog modela kvantne tačke

S obzirom na definisani model, hamiltonijan fononskog podsistema opisane strukture 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:

$$H = T + V_{eff}^P + V_{eff}^Z , \quad (6.1)$$

gde je T – standardni kinetički član (2.9), V_{eff}^Z – član koji opisuje interakcije unutar posmatrane strukture (zapreminski potencijal interakcije):

$$\begin{aligned} V_{eff}^Z &= \frac{C_\alpha}{4} \sum_{n_x=2}^{N_x-2} \sum_{n_y=2}^{N_y-2} \sum_{n_z=2}^{N_z-2} \left[(u_{\alpha; n_x+1, n_y, n_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z})^2 + (u_{\alpha; n_x-1, n_y, n_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z})^2 + \right. \\ &+ (u_{\alpha; n_x, n_y+1, n_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z})^2 + (u_{\alpha; n_x, n_y-1, n_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z})^2 + \\ &\left. + (u_{\alpha; n_x, n_y, n_z+1} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z})^2 + (u_{\alpha; n_x, n_y, n_z-1} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z})^2 \right] , \end{aligned} \quad (6.2)$$

a V_{eff}^P – član koji obuhvata interakcije sa graničnim slojevima (površinski potencijal interakcije):

$$\begin{aligned}
 V_{eff}^P = & \sum_{\alpha} \frac{C_{\alpha}}{4} \left\{ 2 (1 + \varepsilon) \left[3 u_{\alpha;0,0,0}^2 + 3 u_{\alpha;0,N_y,0}^2 + 2 u_{\alpha;0,1,0}^2 + 2 u_{\alpha;0,N_y-1,0}^2 + \right. \right. \\
 & + 2 u_{\alpha;0,0,1}^2 + 2 u_{\alpha;0,0,N_z}^2 + 2 u_{\alpha;0,0,N_z-1}^2 + u_{\alpha;0,1,N_z-1}^2 + u_{\alpha;0,N_y-1,1}^2 + 2 u_{\alpha;0,N_y,1}^2 + \\
 & + u_{\alpha;0,1,1}^2 + u_{\alpha;0,N_y-1,N_z-1}^2 + u_{\alpha;0,N_y,N_z}^2 + 2 u_{\alpha;0,N_y,N_z-1}^2 + 2 u_{\alpha;1,0,0}^2 + 2 u_{\alpha;1,N_y,0}^2 + \\
 & + u_{\alpha;1,N_y-1,0}^2 + u_{\alpha;1,1,0}^2 + u_{\alpha;1,0,1}^2 + u_{\alpha;1,0,N_z}^2 + u_{\alpha;1,0,N_z-1}^2 + u_{\alpha;1,N_y,1}^2 + u_{\alpha;1,N_y,N_z}^2 + \\
 & + u_{\alpha;1,N_y,N_z-1}^2 + 2 u_{\alpha;N_x-1,0,0}^2 + 2 u_{\alpha;N_x-1,N_y,0}^2 + u_{\alpha;N_x-1,1,0}^2 + u_{\alpha;N_x-1,N_y-1,0}^2 + \\
 & + u_{\alpha;N_x-1,0,1}^2 + u_{\alpha;N_x-1,0,N_z}^2 + u_{\alpha;N_x-1,0,N_z-1}^2 + u_{\alpha;N_x-1,N_y,1}^2 + u_{\alpha;N_x-1,N_y,N_z}^2 + \\
 & + u_{\alpha;N_x-1,N_y,N_z-1}^2 + 3 u_{\alpha;N_x,0,0}^2 + u_{\alpha;N_x,1,1}^2 + 3 u_{\alpha;N_x,N_y,0}^2 + 2 u_{\alpha;N_x,1,0}^2 + \\
 & + 2 u_{\alpha;N_x,N_y-1,0}^2 + u_{\alpha;N_x,N_y-1,1}^2 + 2 u_{\alpha;N_x,0,1}^2 + u_{\alpha;N_x,0,N_z}^2 + 2 u_{\alpha;N_x,0,N_z-1}^2 + \\
 & + u_{\alpha;N_x,1,N_z-1}^2 + 2 u_{\alpha;N_x,N_y,1}^2 + u_{\alpha;N_x,N_y-1,N_z-1}^2 + 2 u_{\alpha;N_x,N_y,N_z-1}^2 + 2 u_{\alpha;N_x,N_y,N_z}^2 \Big] + \\
 & + 2 (1 + \gamma) \left[u_{\alpha;0,0,N_z}^2 + 2 u_{\alpha;0,1,N_z}^2 + 2 u_{\alpha;0,N_y,N_z}^2 + 2 u_{\alpha;0,N_y-1,N_z}^2 + u_{\alpha;1,0,N_z}^2 + \right. \\
 & + u_{\alpha;1,1,N_z}^2 + u_{\alpha;1,N_y,N_z}^2 + u_{\alpha;1,N_y-1,N_z}^2 + u_{\alpha;N_x-1,0,N_z}^2 + u_{\alpha;N_x-1,1,N_z}^2 + u_{\alpha;N_x-1,N_y,N_z}^2 + \\
 & + u_{\alpha;N_x-1,N_y-1,N_z}^2 + 2 u_{\alpha;N_x,0,N_z}^2 + 2 u_{\alpha;N_x,1,N_z}^2 + 2 u_{\alpha;N_x,N_y-1,N_z}^2 + u_{\alpha;N_x,N_y,N_z}^2 \Big] + \\
 & + 2 \left[(u_{\alpha;1,0,0} - u_{\alpha;0,0,0})^2 + (u_{\alpha;1,0,1} - u_{\alpha;0,0,1})^2 + \right. \\
 & + (u_{\alpha;1,1,0} - u_{\alpha;0,1,0})^2 + (u_{\alpha;1,1,1} - u_{\alpha;0,1,1})^2 + \\
 & + (u_{\alpha;1,N_y,0} - u_{\alpha;0,N_y,0})^2 + (u_{\alpha;1,N_y,1} - u_{\alpha;0,N_y,1})^2 + \\
 & + (u_{\alpha;1,N_y-1,0} - u_{\alpha;0,N_y-1,0})^2 + (u_{\alpha;1,N_y-1,1} - u_{\alpha;0,N_y-1,1})^2 + \\
 & + (u_{\alpha;1,0,N_z} - u_{\alpha;0,0,N_z})^2 + (u_{\alpha;1,0,N_z-1} - u_{\alpha;0,0,N_z-1})^2 + \\
 & + (u_{\alpha;1,1,N_z} - u_{\alpha;0,1,N_z})^2 + (u_{\alpha;1,1,N_z-1} - u_{\alpha;0,1,N_z-1})^2 + \\
 & + (u_{\alpha;1,N_y,N_z} - u_{\alpha;0,N_y,N_z})^2 + (u_{\alpha;1,N_y,N_z-1} - u_{\alpha;0,N_y,N_z-1})^2 + \\
 & + (u_{\alpha;1,N_y-1,N_z} - u_{\alpha;0,N_y-1,N_z})^2 + (u_{\alpha;1,N_y-1,N_z-1} - u_{\alpha;0,N_y-1,N_z-1})^2 + \\
 & + (u_{\alpha;0,0,0} - u_{\alpha;0,1,0})^2 + (u_{\alpha;0,0,0} - u_{\alpha;0,0,1})^2 + \\
 & + (u_{\alpha;0,0,1} - u_{\alpha;0,1,1})^2 + (u_{\alpha;0,1,0} - u_{\alpha;0,1,1})^2 \Big] + \\
 & + (u_{\alpha;0,0,1} - u_{\alpha;0,0,2})^2 + (u_{\alpha;0,1,0} - u_{\alpha;0,2,0})^2 + \\
 & + (u_{\alpha;0,1,1} - u_{\alpha;0,2,1})^2 + (u_{\alpha;0,1,1} - u_{\alpha;0,1,2})^2 + \\
 & + 2 (u_{\alpha;0,N_y,0} - u_{\alpha;0,N_y-1,0})^2 + 2 (u_{\alpha;0,N_y,0} - u_{\alpha;0,N_y,1})^2 + \\
 & + 2 (u_{\alpha;0,N_y,1} - u_{\alpha;0,N_y-1,1})^2 + 2 (u_{\alpha;0,N_y-1,0} - u_{\alpha;0,N_y-1,1})^2 + \\
 & + (u_{\alpha;0,N_y,1} - u_{\alpha;0,N_y,2})^2 + (u_{\alpha;0,N_y-1,0} - u_{\alpha;0,N_y-2,0})^2 + \\
 & + (u_{\alpha;0,N_y-1,1} - u_{\alpha;0,N_y-2,1})^2 + (u_{\alpha;0,N_y-1,1} - u_{\alpha;0,N_y-1,2})^2 + \\
 & + 2 (u_{\alpha;0,0,N_z} - u_{\alpha;0,1,N_z})^2 + 2 (u_{\alpha;0,0,N_z} - u_{\alpha;0,0,N_z-1})^2 + \\
 & + 2 (u_{\alpha;0,0,N_z-1} - u_{\alpha;0,1,N_z-1})^2 + 2 (u_{\alpha;0,1,N_z} - u_{\alpha;0,1,N_z-1})^2 + \\
 & + (u_{\alpha;0,0,N_z-1} - u_{\alpha;0,0,N_z-2})^2 + (u_{\alpha;0,1,N_z} - u_{\alpha;0,2,N_z})^2 + \\
 & + (u_{\alpha;0,1,N_z-1} - u_{\alpha;0,2,N_z-1})^2 + (u_{\alpha;0,1,N_z-1} - u_{\alpha;0,1,N_z-2})^2 + \\
 & + 2 (u_{\alpha;0,N_y,N_z} - u_{\alpha;0,N_y-1,N_z})^2 + 2 (u_{\alpha;0,N_y,N_z} - u_{\alpha;0,N_y,N_z-1})^2 +
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + 2(u_{\alpha;0,N_y,N_z-1} - u_{\alpha;0,N_y-1,N_z-1})^2 + 2(u_{\alpha;0,N_y-1,N_z} - u_{\alpha;0,N_y-1,N_z-1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;0,N_y,N_z-1} - u_{\alpha;0,N_y,N_z-2})^2 + (u_{\alpha;0,N_y-1,N_z} - u_{\alpha;0,N_y-2,N_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;0,N_y-1,N_z-1} - u_{\alpha;0,N_y-2,N_z-1})^2 + (u_{\alpha;0,N_y-1,N_z-1} - u_{\alpha;0,N_y-1,N_z-2})^2 + \\
& + (u_{\alpha;2,0,0} - u_{\alpha;1,0,0})^2 + (u_{\alpha;2,0,1} - u_{\alpha;1,0,1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;2,1,0} - u_{\alpha;1,1,0})^2 + (u_{\alpha;2,1,1} - u_{\alpha;1,1,1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;2,N_y,0} - u_{\alpha;1,N_y,0})^2 + (u_{\alpha;2,N_y,1} - u_{\alpha;1,N_y,1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;2,N_y-1,0} - u_{\alpha;1,N_y-1,0})^2 + (u_{\alpha;2,N_y-1,1} - u_{\alpha;1,N_y-1,1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;2,0,N_z} - u_{\alpha;1,0,N_z})^2 + (u_{\alpha;2,0,N_z-1} - u_{\alpha;1,0,N_z-1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;2,1,N_z} - u_{\alpha;1,1,N_z})^2 + (u_{\alpha;2,1,N_z-1} - u_{\alpha;1,1,N_z-1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;2,N_y,N_z} - u_{\alpha;1,N_y,N_z})^2 + (u_{\alpha;2,N_y,N_z-1} - u_{\alpha;1,N_y,N_z-1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;2,N_y-1,N_z} - u_{\alpha;1,N_y-1,N_z})^2 + (u_{\alpha;2,N_y-1,N_z-1} - u_{\alpha;1,N_y-1,N_z-1})^2 + \\
& + 2(u_{\alpha;1,0,0} - u_{\alpha;1,1,0})^2 + 2(u_{\alpha;1,0,0} - u_{\alpha;1,0,1})^2 + \\
& + 2(u_{\alpha;1,0,1} - u_{\alpha;1,1,1})^2 + 2(u_{\alpha;1,1,0} - u_{\alpha;1,1,1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;1,0,1} - u_{\alpha;1,0,2})^2 + (u_{\alpha;1,1,0} - u_{\alpha;1,2,0})^2 + \\
& + (u_{\alpha;1,1,1} - u_{\alpha;1,2,1})^2 + (u_{\alpha;1,1,1} - u_{\alpha;1,1,2})^2 + \\
& + 2(u_{\alpha;1,N_y,0} - u_{\alpha;1,N_y-1,0})^2 + 2(u_{\alpha;1,N_y,0} - u_{\alpha;1,N_y,1})^2 + \\
& + 2(u_{\alpha;1,N_y,1} - u_{\alpha;1,N_y-1,1})^2 + 2(u_{\alpha;1,N_y-1,0} - u_{\alpha;1,N_y-1,1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;1,N_y,1} - u_{\alpha;1,N_y,2})^2 + (u_{\alpha;1,N_y-1,0} - u_{\alpha;1,N_y-2,0})^2 + \\
& + (u_{\alpha;1,N_y-1,1} - u_{\alpha;1,N_y-2,1})^2 + (u_{\alpha;1,N_y-1,1} - u_{\alpha;1,N_y-1,2})^2 + \\
& + 2(u_{\alpha;1,0,N_z} - u_{\alpha;1,1,N_z})^2 + 2(u_{\alpha;1,0,N_z} - u_{\alpha;1,0,N_z-1})^2 + \\
& + 2(u_{\alpha;1,0,N_z-1} - u_{\alpha;1,1,N_z-1})^2 + 2(u_{\alpha;1,1,N_z} - u_{\alpha;1,1,N_z-1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;1,1,N_z-1} - u_{\alpha;1,2,N_z-1})^2 + (u_{\alpha;1,1,N_z-1} - u_{\alpha;1,1,N_z-2})^2 + \\
& + 2(u_{\alpha;1,N_y,N_z} - u_{\alpha;1,N_y-1,N_z})^2 + 2(u_{\alpha;1,N_y,N_z} - u_{\alpha;1,N_y,N_z-1})^2 + \\
& + 2(u_{\alpha;1,N_y,N_z-1} - u_{\alpha;1,N_y-1,N_z-1})^2 + 2(u_{\alpha;1,N_y-1,N_z} - u_{\alpha;1,N_y-1,N_z-1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;1,N_y,N_z-1} - u_{\alpha;1,N_y,N_z-2})^2 + (u_{\alpha;1,N_y-1,N_z} - u_{\alpha;1,N_y-2,N_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;1,N_y-1,N_z-1} - u_{\alpha;1,N_y-2,N_z-1})^2 + (u_{\alpha;1,N_y-1,N_z-1} - u_{\alpha;1,N_y-1,N_z-2})^2 + \\
& + 2[(u_{\alpha;N_x-1,0,0} - u_{\alpha;N_x,0,0})^2 + (u_{\alpha;N_x-1,0,1} - u_{\alpha;N_x,0,1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;N_x-1,1,0} - u_{\alpha;N_x,1,0})^2 + (u_{\alpha;N_x-1,1,1} - u_{\alpha;N_x,1,1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;N_x-1,N_y,0} - u_{\alpha;N_x,N_y,0})^2 + (u_{\alpha;N_x-1,N_y,1} - u_{\alpha;N_x,N_y,1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;N_x-1,N_y-1,0} - u_{\alpha;N_x,N_y-1,0})^2 + (u_{\alpha;N_x-1,N_y-1,1} - u_{\alpha;N_x,N_y-1,1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;N_x-1,0,N_z} - u_{\alpha;N_x,0,N_z})^2 + (u_{\alpha;N_x-1,0,N_z-1} - u_{\alpha;N_x,0,N_z-1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;N_x-1,1,N_z} - u_{\alpha;N_x,1,N_z})^2 + (u_{\alpha;N_x-1,1,N_z-1} - u_{\alpha;N_x,1,N_z-1})^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-1} - u_{\alpha;N_x,N_y,N_z-1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;N_x-1,N_y-1,N_z} - u_{\alpha;N_x,N_y-1,N_z})^2 + (u_{\alpha;N_x-1,N_y-1,N_z-1} - u_{\alpha;N_x,N_y-1,N_z-1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;N_x,0,0} - u_{\alpha;N_x,1,0})^2 + (u_{\alpha;N_x,0,0} - u_{\alpha;N_x,0,1})^2 +
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + (u_{\alpha;N_x,0,1} - u_{\alpha;N_x,1,1})^2 + (u_{\alpha;N_x,1,0} - u_{\alpha;N_x,1,1})^2 \Big] + \\
& + (u_{\alpha;N_x-2,0,0} - u_{\alpha;N_x-1,0,0})^2 + (u_{\alpha;N_x-2,0,1} - u_{\alpha;N_x-1,0,1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;N_x-2,1,0} - u_{\alpha;N_x-1,1,0})^2 + (u_{\alpha;N_x-2,1,1} - u_{\alpha;N_x-1,1,1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;N_x-2,N_y,0} - u_{\alpha;N_x-1,N_y,0})^2 + (u_{\alpha;N_x-2,N_y,1} - u_{\alpha;N_x-1,N_y,1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;N_x-2,N_y-1,0} - u_{\alpha;N_x-1,N_y-1,0})^2 + (u_{\alpha;N_x-2,N_y-1,1} - u_{\alpha;N_x-1,N_y-1,1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;N_x-2,0,N_z} - u_{\alpha;N_x-1,0,N_z})^2 + (u_{\alpha;N_x-2,0,N_z-1} - u_{\alpha;N_x-1,0,N_z-1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;N_x-2,1,N_z} - u_{\alpha;N_x-1,1,N_z})^2 + (u_{\alpha;N_x-2,1,N_z-1} - u_{\alpha;N_x-1,1,N_z-1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;N_x-2,N_y,N_z} - u_{\alpha;N_x-1,N_y,N_z})^2 + (u_{\alpha;N_x-2,N_y,N_z-1} - u_{\alpha;N_x-1,N_y,N_z-1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;N_x-2,N_y-1,N_z} - u_{\alpha;N_x-1,N_y-1,N_z})^2 + (u_{\alpha;N_x-2,N_y-1,N_z-1} - u_{\alpha;N_x-1,N_y-1,N_z-1})^2 + \\
& + 2 (u_{\alpha;N_x-1,0,0} - u_{\alpha;N_x-1,1,0})^2 + 2 (u_{\alpha;N_x-1,0,0} - u_{\alpha;N_x-1,0,1})^2 + \\
& + 2 (u_{\alpha;N_x-1,0,1} - u_{\alpha;N_x-1,1,1})^2 + 2 (u_{\alpha;N_x-1,1,0} - u_{\alpha;N_x-1,1,1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;N_x-1,0,1} - u_{\alpha;N_x-1,0,2})^2 + (u_{\alpha;N_x-1,1,0} - u_{\alpha;N_x-1,2,0})^2 + \\
& + (u_{\alpha;N_x-1,1,1} - u_{\alpha;N_x-1,2,1})^2 + (u_{\alpha;N_x-1,1,1} - u_{\alpha;N_x-1,1,2})^2 + \\
& + 2 (u_{\alpha;N_x-1,N_y,0} - u_{\alpha;N_x-1,N_y-1,0})^2 + 2 (u_{\alpha;N_x-1,N_y,0} - u_{\alpha;N_x-1,N_y,1})^2 + \\
& + 2 (u_{\alpha;N_x-1,N_y,1} - u_{\alpha;N_x-1,N_y-1,1})^2 + 2 (u_{\alpha;N_x-1,N_y-1,0} - u_{\alpha;N_x-1,N_y-1,1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;N_x-1,N_y,1} - u_{\alpha;N_x-1,N_y,2})^2 + (u_{\alpha;N_x-1,N_y-1,0} - u_{\alpha;N_x-1,N_y-2,0})^2 + \\
& + (u_{\alpha;N_x-1,N_y-1,1} - u_{\alpha;N_x-1,N_y-2,1})^2 + (u_{\alpha;N_x-1,N_y-1,1} - u_{\alpha;N_x-1,N_y-1,2})^2 + \\
& + 2 (u_{\alpha;N_x-1,0,N_z} - u_{\alpha;N_x-1,1,N_z})^2 + 2 (u_{\alpha;N_x-1,0,N_z} - u_{\alpha;N_x-1,0,N_z-1})^2 + \\
& + 2 (u_{\alpha;N_x-1,0,N_z-1} - u_{\alpha;N_x-1,1,N_z-1})^2 + 2 (u_{\alpha;N_x-1,1,N_z} - u_{\alpha;N_x-1,1,N_z-1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;N_x-1,0,N_z-1} - u_{\alpha;N_x-1,0,N_z-2})^2 + (u_{\alpha;N_x-1,1,N_z} - u_{\alpha;N_x-1,2,N_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;N_x-1,1,N_z-1} - u_{\alpha;N_x-1,2,N_z-1})^2 + (u_{\alpha;N_x-1,1,N_z-1} - u_{\alpha;N_x-1,1,N_z-2})^2 + \\
& + 2 (u_{\alpha;N_x-1,N_y,N_z} - u_{\alpha;N_x-1,N_y-1,N_z})^2 + 2 (u_{\alpha;N_x-1,N_y,N_z} - u_{\alpha;N_x-1,N_y,N_z-1})^2 + \quad (6.3) \\
& + 2 (u_{\alpha;N_x-1,N_y,N_z-1} - u_{\alpha;N_x-1,N_y-1,N_z-1})^2 + 2 (u_{\alpha;N_x-1,N_y-1,N_z} - u_{\alpha;N_x-1,N_y-1,N_z-1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;N_x-1,N_y,N_z-1} - u_{\alpha;N_x-1,N_y,N_z-2})^2 + (u_{\alpha;N_x-1,N_y-1,N_z} - u_{\alpha;N_x-1,N_y-2,N_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;N_x-1,N_y-1,N_z-1} - u_{\alpha;N_x-1,N_y-2,N_z-1})^2 + (u_{\alpha;N_x-1,N_y-1,N_z-1} - u_{\alpha;N_x-1,N_y-1,N_z-2})^2 + \\
& + (u_{\alpha;N_x,0,1} - u_{\alpha;N_x,0,2})^2 + (u_{\alpha;N_x,1,0} - u_{\alpha;N_x,2,0})^2 + \\
& + (u_{\alpha;N_x,1,1} - u_{\alpha;N_x,2,1})^2 + (u_{\alpha;N_x,1,1} - u_{\alpha;N_x,1,2})^2 + \\
& + 2 (u_{\alpha;N_x,N_y,0} - u_{\alpha;N_x,N_y-1,0})^2 + 2 (u_{\alpha;N_x,N_y,0} - u_{\alpha;N_x,N_y,1})^2 + \\
& + 2 (u_{\alpha;N_x,N_y,1} - u_{\alpha;N_x,N_y-1,1})^2 + 2 (u_{\alpha;N_x,N_y-1,0} - u_{\alpha;N_x,N_y-1,1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;N_x,N_y,1} - u_{\alpha;N_x,N_y,2})^2 + (u_{\alpha;N_x,N_y-1,0} - u_{\alpha;N_x,N_y-2,0})^2 + \\
& + (u_{\alpha;N_x,N_y-1,1} - u_{\alpha;N_x,N_y-2,1})^2 + (u_{\alpha;N_x,N_y-1,1} - u_{\alpha;N_x,N_y-1,2})^2 + \\
& + 2 (u_{\alpha;N_x,0,N_z} - u_{\alpha;N_x,1,N_z})^2 + 2 (u_{\alpha;N_x,0,N_z} - u_{\alpha;N_x,0,N_z-1})^2 + \\
& + 2 (u_{\alpha;N_x,0,N_z-1} - u_{\alpha;N_x,1,N_z-1})^2 + 2 (u_{\alpha;N_x,1,N_z} - u_{\alpha;N_x,1,N_z-1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;N_x,0,N_z-1} - u_{\alpha;N_x,0,N_z-2})^2 + (u_{\alpha;N_x,1,N_z} - u_{\alpha;N_x,2,N_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;N_x,1,N_z-1} - u_{\alpha;N_x,2,N_z-1})^2 + (u_{\alpha;N_x,1,N_z-1} - u_{\alpha;N_x,1,N_z-2})^2 + \\
& + 2 (u_{\alpha;N_x,N_y,N_z} - u_{\alpha;N_x,N_y-1,N_z})^2 + 2 (u_{\alpha;N_x,N_y,N_z} - u_{\alpha;N_x,N_y,N_z-1})^2 + \\
& + 2 (u_{\alpha;N_x,N_y,N_z-1} - u_{\alpha;N_x,N_y-1,N_z-1})^2 + 2 (u_{\alpha;N_x,N_y-1,N_z} - u_{\alpha;N_x,N_y-1,N_z-1})^2 +
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \left(u_{\alpha;N_x,N_y,N_z-1} - u_{\alpha;N_x,N_y,N_z-2} \right)^2 + \left(u_{\alpha;N_x,N_y-1,N_z} - u_{\alpha;N_x,N_y-2,N_z} \right)^2 + \\
& + \left(u_{\alpha;N_x,N_y-1,N_z-1} - u_{\alpha;N_x,N_y-2,N_z-1} \right)^2 + \left(u_{\alpha;N_x,N_y-1,N_z-1} - u_{\alpha;N_x,N_y-1,N_z-2} \right)^2 + \\
& + \sum_{n_x=2}^{N_x-2} \left\{ 2 (1 + \varepsilon) \left[2 u_{\alpha;n_x,0,0}^2 + u_{\alpha;n_x,0,1}^2 + u_{\alpha;n_x,0,N_z-1}^2 + u_{\alpha;n_x,0,N_z}^2 + u_{\alpha;n_x,1,0}^2 + \right. \right. \\
& + u_{\alpha;n_x,N_y-1,0}^2 + 2 u_{\alpha;n_x,N_y,0}^2 + u_{\alpha;n_x,N_y,1}^2 + u_{\alpha;n_x,N_y,N_z-1}^2 + u_{\alpha;n_x,N_y,N_z}^2 \left. \left. \right] + \right. \\
& + 2 (1 + \gamma) \left[u_{\alpha;n_x,0,N_z}^2 + u_{\alpha;n_x,1,N_z}^2 + u_{\alpha;n_x,N_y-1,N_z}^2 + u_{\alpha;n_x,N_y,N_z}^2 \right] + \\
& + (u_{\alpha;n_x+1,0,0} - u_{\alpha;n_x,0,0})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,0,0} - u_{\alpha;n_x,0,0})^2 + \\
& + 2 (u_{\alpha;n_x,1,0} - u_{\alpha;n_x,0,0})^2 + 2 (u_{\alpha;n_x,0,1} - u_{\alpha;n_x,0,0})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x+1,0,1} - u_{\alpha;n_x,0,1})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,0,1} - u_{\alpha;n_x,0,1})^2 + \\
& + 2 (u_{\alpha;n_x,1,1} - u_{\alpha;n_x,0,1})^2 + (u_{\alpha;n_x,0,2} - u_{\alpha;n_x,0,1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x+1,0,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,0,N_z-1})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,0,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,0,N_z-1})^2 + \\
& + 2 (u_{\alpha;n_x,1,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,0,N_z-1})^2 + 2 (u_{\alpha;n_x,0,N_z} - u_{\alpha;n_x,0,N_z-1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x,0,N_z-2} - u_{\alpha;n_x,0,N_z-1})^2 + (u_{\alpha;n_x+1,0,N_z} - u_{\alpha;n_x,0,N_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x-1,0,N_z} - u_{\alpha;n_x,0,N_z})^2 + 2 (u_{\alpha;n_x,1,N_z} - u_{\alpha;n_x,0,N_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x+1,1,0} - u_{\alpha;n_x,1,0})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,1,0} - u_{\alpha;n_x,1,0})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x,2,0} - u_{\alpha;n_x,1,0})^2 + 2 (u_{\alpha;n_x,1,1} - u_{\alpha;n_x,1,0})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x+1,1,1} - u_{\alpha;n_x,1,1})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,1,1} - u_{\alpha;n_x,1,1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x,2,1} - u_{\alpha;n_x,1,1})^2 + (u_{\alpha;n_x,1,2} - u_{\alpha;n_x,1,1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x+1,1,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,1,N_z-1})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,1,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,1,N_z-1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x,2,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,1,N_z-1})^2 + 2 (u_{\alpha;n_x,1,N_z} - u_{\alpha;n_x,1,N_z-1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x,1,N_z-2} - u_{\alpha;n_x,1,N_z-1})^2 + (u_{\alpha;n_x+1,1,N_z} - u_{\alpha;n_x,1,N_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x-1,1,N_z} - u_{\alpha;n_x,1,N_z})^2 + (u_{\alpha;n_x,2,N_z} - u_{\alpha;n_x,1,N_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x+1,N_y-1,0} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,0})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,N_y-1,0} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,0})^2 + \\
& + 2 (u_{\alpha;n_x,N_y,0} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,0})^2 + (u_{\alpha;n_x,N_y-2,0} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,0})^2 + \\
& + 2 (u_{\alpha;n_x,N_y-1,1} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,0})^2 + (u_{\alpha;n_x+1,N_y-1,1} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x-1,N_y-1,1} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,1})^2 + 2 (u_{\alpha;n_x,N_y,1} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x,N_y-2,1} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,1})^2 + (u_{\alpha;n_x,N_y-1,2} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x+1,N_y-1,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,N_z-1})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,N_y-1,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,N_z-1})^2 + \\
& + 2 (u_{\alpha;n_x,N_y,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,N_z-1})^2 + 2 (u_{\alpha;n_x,N_y-1,N_z} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,N_z-1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x,N_y-2,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,N_z-1})^2 + (u_{\alpha;n_x,N_y-1,N_z-2} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,N_z-1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x+1,N_y-1,N_z} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,N_z})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,N_y-1,N_z} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,N_z})^2 + \\
& + 2 (u_{\alpha;n_x,N_y,N_z} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,N_z})^2 + (u_{\alpha;n_x,N_y-2,N_z} - u_{\alpha;n_x,N_y-1,N_z})^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+1,N_y,1} - u_{\alpha;n_x,N_y,1})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,N_y,1} - u_{\alpha;n_x,N_y,1})^2 + \\
& + 2 (u_{\alpha;n_x,N_y,1} - u_{\alpha;n_x,N_y,0})^2 + (u_{\alpha;n_x,N_y,2} - u_{\alpha;n_x,N_y,1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;n_x+1,N_y,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,N_y,N_z-1})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,N_y,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,N_y,N_z-1})^2 +
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + 2(u_{\alpha;n_x,N_y,N_z} - u_{\alpha;n_x,N_y,N_z-1})^2 + (u_{\alpha;n_x,N_y,N_z-2} - u_{\alpha;n_x,N_y,N_z-1})^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 \Big\} + \\
& + \sum_{n_y=2}^{N_y-2} \left\{ 2(1+\varepsilon) \left[2u_{\alpha;0,n_y,0}^2 + u_{\alpha;0,n_y,1}^2 + u_{\alpha;0,n_y,N_z-1}^2 + u_{\alpha;1,n_y,0}^2 + \right. \right. \\
& + u_{\alpha;N_x-1,n_y,0}^2 + 2u_{\alpha;N_x,n_y,0}^2 + u_{\alpha;N_x,n_y,1}^2 + u_{\alpha;N_x,n_y,N_z-1}^2 + \\
& + 2(1+\gamma) \left[2u_{\alpha;0,n_y,N_z}^2 + u_{\alpha;1,n_y,N_z}^2 + u_{\alpha;N_x-1,n_y,N_z}^2 + 2u_{\alpha;N_x,n_y,N_z}^2 \right] + \\
& + 2 \left[(u_{\alpha;0,n_y,0} - u_{\alpha;0,n_y,1})^2 + (u_{\alpha;1,n_y,0} - u_{\alpha;0,n_y,0})^2 + (u_{\alpha;1,n_y,1} - u_{\alpha;0,n_y,1})^2 + \right. \\
& + (u_{\alpha;1,n_y,N_z} - u_{\alpha;0,n_y,N_z})^2 + (u_{\alpha;1,n_y,N_z-1} - u_{\alpha;0,n_y,N_z-1})^2 + (u_{\alpha;1,n_y,0} - u_{\alpha;1,n_y,1})^2 \Big] + \\
& + (u_{\alpha;0,n_y+1,0} - u_{\alpha;0,n_y,0})^2 + (u_{\alpha;0,n_y-1,0} - u_{\alpha;0,n_y,0})^2 + (u_{\alpha;0,n_y+1,1} - u_{\alpha;0,n_y,1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;0,n_y-1,1} - u_{\alpha;0,n_y,1})^2 + (u_{\alpha;0,n_y,1} - u_{\alpha;0,n_y,2})^2 + (u_{\alpha;0,n_y,N_z} - u_{\alpha;0,n_y,N_z-1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;0,n_y+1,N_z} - u_{\alpha;0,n_y,N_z})^2 + (u_{\alpha;0,n_y-1,N_z} - u_{\alpha;0,n_y,N_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;0,n_y,N_z-1} - u_{\alpha;0,n_y,N_z-2})^2 + (u_{\alpha;0,n_y,N_z} - u_{\alpha;0,n_y,N_z-1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;0,n_y+1,N_z-1} - u_{\alpha;0,n_y,N_z-1})^2 + (u_{\alpha;0,n_y-1,N_z-1} - u_{\alpha;0,n_y,N_z-1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;2,n_y,0} - u_{\alpha;1,n_y,0})^2 + (u_{\alpha;1,n_y+1,0} - u_{\alpha;1,n_y,0})^2 + (u_{\alpha;1,n_y-1,0} - u_{\alpha;1,n_y,0})^2 + \\
& + (u_{\alpha;2,n_y,1} - u_{\alpha;1,n_y,1})^2 + (u_{\alpha;1,n_y+1,1} - u_{\alpha;1,n_y,1})^2 + (u_{\alpha;1,n_y-1,1} - u_{\alpha;1,n_y,1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;1,n_y,1} - u_{\alpha;1,n_y,2})^2 + (u_{\alpha;1,n_y,N_z} - u_{\alpha;1,n_y,N_z-1})^2 + (u_{\alpha;2,n_y,N_z} - u_{\alpha;1,n_y,N_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;1,n_y+1,N_z} - u_{\alpha;1,n_y,N_z})^2 + (u_{\alpha;1,n_y-1,N_z} - u_{\alpha;1,n_y,N_z})^2 + (u_{\alpha;1,n_y,N_z-1} - u_{\alpha;1,n_y,N_z-2})^2 + \\
& + (u_{\alpha;1,n_y,N_z} - u_{\alpha;1,n_y,N_z-1})^2 + (u_{\alpha;2,n_y,N_z-1} - u_{\alpha;1,n_y,N_z-1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;1,n_y+1,N_z-1} - u_{\alpha;1,n_y,N_z-1})^2 + (u_{\alpha;1,n_y-1,N_z-1} - u_{\alpha;1,n_y,N_z-1})^2 + \\
& + 2 \left[(u_{\alpha;N_x-1,n_y,0} - u_{\alpha;N_x-1,n_y,1})^2 + (u_{\alpha;N_x,n_y,0} - u_{\alpha;N_x-1,n_y,0})^2 + \right. \\
& + (u_{\alpha;N_x,n_y,1} - u_{\alpha;N_x-1,n_y,1})^2 + (u_{\alpha;N_x,n_y,N_z} - u_{\alpha;N_x-1,n_y,N_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;N_x,n_y,N_z-1} - u_{\alpha;N_x-1,n_y,N_z-1})^2 + (u_{\alpha;N_x,n_y,0} - u_{\alpha;N_x,n_y,1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;N_x-2,n_y,0} - u_{\alpha;N_x-1,n_y,0})^2 + (u_{\alpha;N_x-1,n_y+1,0} - u_{\alpha;N_x-1,n_y,0})^2 + \\
& + (u_{\alpha;N_x-1,n_y-1,0} - u_{\alpha;N_x-1,n_y,0})^2 + (u_{\alpha;N_x-2,n_y,1} - u_{\alpha;N_x-1,n_y,1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;N_x-1,n_y+1,1} - u_{\alpha;N_x-1,n_y,1})^2 + (u_{\alpha;N_x-1,n_y-1,1} - u_{\alpha;N_x-1,n_y,1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;N_x-1,n_y,1} - u_{\alpha;N_x-1,n_y,2})^2 + (u_{\alpha;N_x-1,n_y,N_z} - u_{\alpha;N_x-1,n_y,N_z-1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;N_x-2,n_y,N_z} - u_{\alpha;N_x-1,n_y,N_z})^2 + (u_{\alpha;N_x-1,n_y+1,N_z} - u_{\alpha;N_x-1,n_y,N_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;N_x-1,n_y-1,N_z} - u_{\alpha;N_x-1,n_y,N_z})^2 + (u_{\alpha;N_x-1,n_y,N_z-1} - u_{\alpha;N_x-1,n_y,N_z-2})^2 + \\
& + (u_{\alpha;N_x-1,n_y,N_z} - u_{\alpha;N_x-1,n_y,N_z-1})^2 + (u_{\alpha;N_x-2,n_y,N_z-1} - u_{\alpha;N_x-1,n_y,N_z-1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;N_x-1,n_y+1,N_z-1} - u_{\alpha;N_x-1,n_y,N_z-1})^2 + (u_{\alpha;N_x-1,n_y-1,N_z-1} - u_{\alpha;N_x-1,n_y,N_z-1})^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,n_y+1,1} - u_{\alpha;N_x,n_y,1})^2 + (u_{\alpha;N_x,n_y-1,1} - u_{\alpha;N_x,n_y,1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;N_x,n_y,1} - u_{\alpha;N_x,n_y,2})^2 + (u_{\alpha;N_x,n_y,N_z} - u_{\alpha;N_x,n_y,N_z-1})^2 +
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + (u_{\alpha;N_x,n_y+1,N_z} - u_{\alpha;N_x,n_y,N_z})^2 + (u_{\alpha;N_x,n_y-1,N_z} - u_{\alpha;N_x,n_y,N_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;N_x,n_y,N_z-1} - u_{\alpha;N_x,n_y,N_z-2})^2 + (u_{\alpha;N_x,n_y,N_z} - u_{\alpha;N_x,n_y,N_z-1})^2 + \\
& + (u_{\alpha;N_x,n_y+1,N_z-1} - u_{\alpha;N_x,n_y,N_z-1})^2 + (u_{\alpha;N_x,n_y-1,N_z-1} - u_{\alpha;N_x,n_y,N_z-1})^2 \Big\} + \\
& + \sum_{n_z=2}^{N_z-2} \left\{ 2 (1 + \varepsilon) \left[2 u_{\alpha;0,0,n_z}^2 + u_{\alpha;0,1,n_z}^2 + u_{\alpha;0,N_y-1,n_z}^2 + 2 u_{\alpha;0,N_y,n_z}^2 + u_{\alpha;1,0,n_z}^2 + u_{\alpha;1,N_y,n_z}^2 + \right. \right. \\
& + u_{\alpha;N_x-1,0,n_z}^2 + u_{\alpha;N_x-1,N_y,n_z}^2 + 2 u_{\alpha;N_x,0,n_z}^2 + u_{\alpha;N_x,1,n_z}^2 + u_{\alpha;N_x,N_y-1,n_z}^2 + 2 u_{\alpha;N_x,N_y,n_z}^2 \Big] \\
& + 2 \left[(u_{\alpha;0,0,n_z} - u_{\alpha;0,1,n_z})^2 + (u_{\alpha;1,0,n_z} - u_{\alpha;0,0,n_z})^2 + (u_{\alpha;1,1,n_z} - u_{\alpha;0,1,n_z})^2 + \right. \\
& + (u_{\alpha;1,N_y,n_z} - u_{\alpha;0,N_y,n_z})^2 + (u_{\alpha;1,N_y-1,n_z} - u_{\alpha;0,N_y-1,n_z})^2 + (u_{\alpha;1,0,n_z} - u_{\alpha;1,1,n_z})^2 \Big] \\
& + (u_{\alpha;0,0,n_z+1} - u_{\alpha;0,0,n_z})^2 + (u_{\alpha;0,0,n_z-1} - u_{\alpha;0,0,n_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;0,1,n_z+1} - u_{\alpha;0,1,n_z})^2 + (u_{\alpha;0,1,n_z-1} - u_{\alpha;0,1,n_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;0,1,n_z} - u_{\alpha;0,2,n_z})^2 + (u_{\alpha;0,N_y,n_z} - u_{\alpha;0,N_y-1,n_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;0,N_y,n_z+1} - u_{\alpha;0,N_y,n_z})^2 + (u_{\alpha;0,N_y,n_z-1} - u_{\alpha;0,N_y,n_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;0,N_y-1,n_z} - u_{\alpha;0,N_y-2,n_z})^2 + (u_{\alpha;0,N_y,n_z} - u_{\alpha;0,N_y-1,n_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;0,N_y-1,n_z+1} - u_{\alpha;0,N_y-1,n_z})^2 + (u_{\alpha;0,N_y-1,n_z-1} - u_{\alpha;0,N_y-1,n_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;2,0,n_z} - u_{\alpha;1,0,n_z})^2 + (u_{\alpha;1,0,n_z+1} - u_{\alpha;1,0,n_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;1,0,n_z-1} - u_{\alpha;1,0,n_z})^2 + (u_{\alpha;2,1,n_z} - u_{\alpha;1,1,n_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;1,1,n_z+1} - u_{\alpha;1,1,n_z})^2 + (u_{\alpha;1,1,n_z-1} - u_{\alpha;1,1,n_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;1,1,n_z} - u_{\alpha;1,2,n_z})^2 + (u_{\alpha;1,N_y,n_z} - u_{\alpha;1,N_y-1,n_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;2,N_y,n_z} - u_{\alpha;1,N_y,n_z})^2 + (u_{\alpha;1,N_y,n_z+1} - u_{\alpha;1,N_y,n_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;1,N_y,n_z-1} - u_{\alpha;1,N_y,n_z})^2 + (u_{\alpha;1,N_y-1,n_z} - u_{\alpha;1,N_y-2,n_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;1,N_y,n_z} - u_{\alpha;1,N_y-1,n_z})^2 + (u_{\alpha;2,N_y-1,n_z} - u_{\alpha;1,N_y-1,n_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;1,N_y-1,n_z+1} - u_{\alpha;1,N_y-1,n_z})^2 + (u_{\alpha;1,N_y-1,n_z-1} - u_{\alpha;1,N_y-1,n_z})^2 + \\
& + 2 \left[(u_{\alpha;N_x-1,0,n_z} - u_{\alpha;N_x-1,1,n_z})^2 + (u_{\alpha;N_x,0,n_z} - u_{\alpha;N_x-1,0,n_z})^2 + \right. \\
& + (u_{\alpha;N_x,1,n_z} - u_{\alpha;N_x-1,1,n_z})^2 + (u_{\alpha;N_x,N_y,n_z} - u_{\alpha;N_x-1,N_y,n_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;N_x,N_y-1,n_z} - u_{\alpha;N_x-1,N_y-1,n_z})^2 + (u_{\alpha;N_x,0,n_z} - u_{\alpha;N_x,1,n_z})^2 \Big] + \\
& + (u_{\alpha;N_x-2,0,n_z} - u_{\alpha;N_x-1,0,n_z})^2 + (u_{\alpha;N_x-1,0,n_z+1} - u_{\alpha;N_x-1,0,n_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;N_x-1,0,n_z-1} - u_{\alpha;N_x-1,0,n_z})^2 + (u_{\alpha;N_x-2,1,n_z} - u_{\alpha;N_x-1,1,n_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;N_x-1,1,n_z+1} - u_{\alpha;N_x-1,1,n_z})^2 + (u_{\alpha;N_x-1,1,n_z-1} - u_{\alpha;N_x-1,1,n_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;N_x-1,1,n_z} - u_{\alpha;N_x-1,2,n_z})^2 + (u_{\alpha;N_x-1,N_y,n_z} - u_{\alpha;N_x-1,N_y-1,n_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;N_x-2,N_y,n_z} - u_{\alpha;N_x-1,N_y,n_z})^2 + (u_{\alpha;N_x-1,N_y,n_z+1} - u_{\alpha;N_x-1,N_y,n_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;N_x-1,N_y,n_z-1} - u_{\alpha;N_x-1,N_y,n_z})^2 + (u_{\alpha;N_x-1,N_y-1,n_z} - u_{\alpha;N_x-1,N_y-2,n_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;N_x-1,N_y,n_z} - u_{\alpha;N_x-1,N_y-1,n_z})^2 + (u_{\alpha;N_x-2,N_y-1,n_z} - u_{\alpha;N_x-1,N_y-1,n_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;N_x-1,N_y-1,n_z+1} - u_{\alpha;N_x-1,N_y-1,n_z})^2 + (u_{\alpha;N_x-1,N_y-1,n_z-1} - u_{\alpha;N_x-1,N_y-1,n_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;N_x,0,n_z+1} - u_{\alpha;N_x,0,n_z})^2 + (u_{\alpha;N_x,0,n_z-1} - u_{\alpha;N_x,0,n_z})^2 +
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + (u_{\alpha;N_x,1,n_z+1} - u_{\alpha;N_x,1,n_z})^2 + (u_{\alpha;N_x,1,n_z-1} - u_{\alpha;N_x,1,n_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;N_x,1,n_z} - u_{\alpha;N_x,2,n_z})^2 + (u_{\alpha;N_x,N_y,n_z} - u_{\alpha;N_x,N_y-1,n_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;N_x,N_y,n_z+1} - u_{\alpha;N_x,N_y,n_z})^2 + (u_{\alpha;N_x,N_y,n_z-1} - u_{\alpha;N_x,N_y,n_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;N_x,N_y-1,n_z} - u_{\alpha;N_x,N_y-2,n_z})^2 + (u_{\alpha;N_x,N_y,n_z} - u_{\alpha;N_x,N_y-1,n_z})^2 + \\
& + (u_{\alpha;N_x,N_y-1,n_z+1} - u_{\alpha;N_x,N_y-1,n_z})^2 + (u_{\alpha;N_x,N_y-1,n_z-1} - u_{\alpha;N_x,N_y-1,n_z})^2 \} \Bigg\}
\end{aligned}$$

6.2 Jednačine kretanja

Zakon disperzije fonona i u ovom slučaju nalazimo metodom Grinovih funkcija, tražeći Grinovu funkciju istog oblika kao i (2.12) pomoću jednačine kretanja (2.13). Kao i u slučaju film-struktura, superrešetki i kvantnih žica, i ovde se moraju izračunati odgovarajući komutatori, odnosno odrediti Grinove funkcije posebno za atome graničnih slojeva, a posebno za atome iz unutrašnjosti kvantne tačke:

$$1. m_z = 0$$

$$\bullet m_y = 0$$

$$\circ m_x = 0$$

$$\begin{aligned}
[p_{\beta;0,0,0}, H] = & - i\hbar C_\beta [(6 + 3\varepsilon) u_{\beta;0,0,0} - u_{\beta;1,0,0} - \\
& - u_{\beta;0,1,0} - u_{\beta;0,0,1}] ,
\end{aligned}$$

$$\circ 1 \leq m_x \leq N_x - 1$$

$$\begin{aligned}
[p_{\beta;m_x,0,0}, H] = & - i\hbar C_\beta [(6 + 2\varepsilon) u_{\beta;m_x,0,0} - u_{\beta;m_x+1,0,0} - \\
& - u_{\beta;m_x-1,0,0} - u_{\beta;m_x,1,0} - u_{\beta;m_x,0,1}] ,
\end{aligned}$$

$$\circ m_x = N_x$$

$$\begin{aligned}
[p_{\beta;N_x,0,0}, H] = & - i\hbar C_\beta [(6 + 3\varepsilon) u_{\beta;N_x,0,0} - u_{\beta;N_x-1,0,0} - \\
& - u_{\beta;N_x,1,0} - u_{\beta;N_x,0,1}] ,
\end{aligned}$$

$$\bullet 1 \leq m_y \leq N_y - 1$$

$$\circ m_x = 0$$

$$\begin{aligned}
[p_{\beta;0,m_y,0}, H] = & - i\hbar C_\beta [(6 + 2\varepsilon) u_{\beta;0,m_y,0} - u_{\beta;1,m_y,0} - \\
& - u_{\beta;0,m_y+1,0} - u_{\beta;0,m_y-1,0} - u_{\beta;0,m_y,1}] ,
\end{aligned}$$

$$\circ 1 \leq m_x \leq N_x - 1$$

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

$$\circ m_x = N_x$$

$$\begin{aligned}
[p_{\beta;N_x,m_y,0}, H] = & - i\hbar C_\beta [(6 + 2\varepsilon) u_{\beta;N_x,m_y,0} - u_{\beta;N_x,m_y+1,0} - \\
& - u_{\beta;N_x,m_y-1,0} - u_{\beta;N_x-1,m_y,0} - u_{\beta;N_x,m_y,1}] ,
\end{aligned}$$

- $m_y = N_y$

- $m_x = 0$

$$\begin{aligned} [p_{\beta;0,N_y,0}, H] = & -i\hbar C_\beta [(6 + 3\varepsilon) u_{\beta;0,N_y,0} - u_{\beta;1,N_y,0} - \\ & - u_{\beta;0,N_y-1,0} - u_{\beta;0,N_y,1}] , \end{aligned}$$

- $1 \leq m_x \leq N_x - 1$

$$\begin{aligned} [p_{\beta;m_x,N_y,0}, H] = & -i\hbar C_\beta [(6 + 2\varepsilon) u_{\beta;m_x,N_y,0} - u_{\beta;m_x+1,N_y,0} - \\ & - u_{\beta;m_x-1,N_y,0} - u_{\beta;m_x,N_y-1,0} - u_{\beta;m_x,N_y,1}] , \end{aligned}$$

- $m_x = N_x$

$$\begin{aligned} [p_{\beta;N_x,N_y,0}, H] = & -i\hbar C_\beta [(6 + 3\varepsilon) u_{\beta;N_x,N_y,0} - u_{\beta;N_x-1,N_y,0} - \\ & - u_{\beta;N_x,N_y-1,0} - u_{\beta;N_x,N_y,1}] , \end{aligned}$$

2. $1 \leq m_z \leq N_z - 1$

- $m_y = 0$

- $m_x = 0$

$$\begin{aligned} [p_{\beta;0,0,m_z}, H] = & -i\hbar C_\beta [(6 + 2\varepsilon) u_{\beta;0,0,m_z} - u_{\beta;0,0,m_z+1} - \\ & - u_{\beta;0,0,m_z-1} - u_{\beta;1,0,m_z} - u_{\beta;0,1,m_z}] , \end{aligned}$$

- $1 \leq m_x \leq N_x - 1$

$$\begin{aligned} [p_{\beta;m_x,0,m_z}, H] = & -i\hbar C_\beta [(6 + \varepsilon) u_{\beta;m_x,0,m_z} - u_{\beta;m_x,1,m_z} - \\ & - u_{\beta;m_x+1,0,m_z} - u_{\beta;m_x-1,0,m_z} - \\ & - u_{\beta;m_x,0,m_z+1} - u_{\beta;m_x,0,m_z-1}] , \end{aligned}$$

- $m_x = N_x$

$$\begin{aligned} [p_{\beta;N_x,0,m_z}, H] = & -i\hbar C_\beta [(6 + 2\varepsilon) u_{\beta;N_x,0,m_z} - u_{\beta;N_x,0,m_z+1} - \\ & - u_{\beta;N_x,0,m_z-1} - u_{\beta;N_x-1,0,m_z} - u_{\beta;N_x,1,m_z}] , \end{aligned}$$

- $1 \leq m_y \leq N_y - 1$

- $m_x = 0$

$$\begin{aligned} [p_{\beta;0,m_y,m_z}, H] = & -i\hbar C_\beta [(6 + \varepsilon) u_{\beta;0,m_y,m_z} - u_{\beta;1,m_y,m_z} - \\ & - u_{\beta;0,m_y+1,m_z} - u_{\beta;0,m_y-1,m_z} - \\ & - u_{\beta;0,m_y,m_z+1} - u_{\beta;0,m_y,m_z-1}] , \end{aligned}$$

- $1 \leq m_x \leq N_x - 1$

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

$$\circ \ m_x = N_x$$

$$\begin{aligned} [p_{\beta;N_x,m_y,m_z}, H] = & -i\hbar C_\beta [(6 + \varepsilon) u_{\beta;N_x,m_y,m_z} - u_{\beta;N_x-1,m_y,m_z} - \\ & - u_{\beta;N_x,m_y+1,m_z} - u_{\beta;N_x,m_y-1,m_z} - \\ & - u_{\beta;N_x,m_y,m_z+1} - u_{\beta;N_x,m_y,m_z-1}], \end{aligned}$$

$$\bullet \ m_y = N_y$$

$$\circ \ m_x = 0$$

$$\begin{aligned} [p_{\beta;0,N_y,m_z}, H] = & -i\hbar C_\beta [(6 + 2\varepsilon) u_{\beta;0,N_y,m_z} - u_{\beta;0,N_y,m_z+1} - \\ & - u_{\beta;0,N_y,m_z-1} - u_{\beta;1,N_y,m_z} - u_{\beta;0,N_y-1,m_z}], \end{aligned}$$

$$\circ \ 1 \leq m_x \leq N_x - 1$$

$$\begin{aligned} [p_{\beta;m_x,N_y,m_z}, H] = & -i\hbar C_\beta [(6 + \varepsilon) u_{\beta;m_x,N_y,m_z} - u_{\beta;m_x,N_y-1,m_z} - \\ & - u_{\beta;m_x+1,N_y,m_z} - u_{\beta;m_x-1,N_y,m_z} - \\ & - u_{\beta;m_x,N_y,m_z+1} - u_{\beta;m_x,N_y,m_z-1}], \end{aligned}$$

$$\circ \ m_x = N_x$$

$$\begin{aligned} [p_{\beta;N_x,N_y,m_z}, H] = & -i\hbar C_\beta [(6 + 2\varepsilon) u_{\beta;N_x,N_y,m_z} - u_{\beta;N_x,N_y,m_z+1} - \\ & - u_{\beta;N_x,N_y,m_z-1} - u_{\beta;N_x-1,N_y,m_z} - u_{\beta;N_x,N_y-1,m_z}], \end{aligned}$$

$$3. \ m_z = N_z$$

$$\bullet \ m_y = 0$$

$$\circ \ m_x = 0$$

$$\begin{aligned} [p_{\beta;0,0,N_z}, H] = & -i\hbar C_\beta [(6 + 2\varepsilon + \gamma) u_{\beta;0,0,N_z} - u_{\beta;1,0,N_z} - \\ & - u_{\beta;0,1,N_z} - u_{\beta;0,0,N_z-1}], \end{aligned}$$

$$\circ \ 1 \leq m_x \leq N_x - 1$$

$$\begin{aligned} [p_{\beta;m_x,0,N_z}, H] = & -i\hbar C_\beta [(6 + \varepsilon + \gamma) u_{\beta;m_x,0,N_z} - u_{\beta;m_x+1,0,N_z} - \\ & - u_{\beta;m_x-1,0,N_z} - u_{\beta;m_x,0,N_z-1} - u_{\beta;m_x,1,N_z}], \end{aligned}$$

$$\circ \ m_x = N_x$$

$$\begin{aligned} [p_{\beta;N_x,0,N_z}, H] = & -i\hbar C_\beta [(6 + 2\varepsilon + \gamma) u_{\beta;N_x,0,N_z} - u_{\beta;N_x-1,0,N_z} - \\ & - u_{\beta;N_x,1,N_z} - u_{\beta;N_x,0,N_z-1}], \end{aligned}$$

$$\bullet \ 1 \leq m_y \leq N_y - 1$$

$$\circ \ m_x = 0$$

$$\begin{aligned} [p_{\beta;0,m_y,N_z}, H] = & -i\hbar C_\beta [(6 + \varepsilon + \gamma) u_{\beta;0,m_y,N_z} - u_{\beta;0,m_y+1,N_z} - \\ & - u_{\beta;0,m_y-1,N_z} - u_{\beta;1,m_y,N_z} - u_{\beta;0,m_y,N_z-1}], \end{aligned}$$

$$\circ \ 1 \leq m_x \leq N_x - 1$$

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

$$\circ \ m_x = N_x$$

$$[p_{\beta;N_x,m_y,N_z}, H] = -i\hbar C_\beta [(6 + \varepsilon + \gamma) u_{\beta;N_x,m_y,N_z} - u_{\beta;N_x,m_y+1,N_z} - u_{\beta;N_x,m_y-1,N_z} - u_{\beta;N_x-1,m_y,N_z} - u_{\beta;N_x,m_y,N_z-1}] ,$$

$$\bullet \ m_y = N_y$$

$$\circ \ m_x = 0$$

$$[p_{\beta;0,N_y,N_z}, H] = -i\hbar C_\beta [(6 + 2\varepsilon + \gamma) u_{\beta;0,N_y,N_z} - u_{\beta;1,N_y,N_z} - u_{\beta;0,N_y-1,N_z} - u_{\beta;0,N_y,N_z-1}] ,$$

$$\circ \ 1 \leq m_x \leq N_x - 1$$

$$[p_{\beta;m_x,N_y,N_z}, H] = -i\hbar C_\beta [(6 + \varepsilon + \gamma) u_{\beta;m_x,N_y,N_z} - u_{\beta;m_x+1,N_y,N_z} - u_{\beta;m_x-1,N_y,N_z} - u_{\beta;m_x,N_y-1,N_z} - u_{\beta;m_x,N_y,N_z-1}] ,$$

$$\circ \ m_x = N_x$$

$$[p_{\beta;N_x,N_y,N_z}, H] = -i\hbar C_\beta [(6 + 2\varepsilon + \gamma) u_{\beta;N_x,N_y,N_z} - u_{\beta;N_x-1,N_y,N_z} - u_{\beta;N_x,N_y-1,N_z} - u_{\beta;N_x,N_y,N_z-1}] .$$

Preimenovanjem $\beta \rightarrow \alpha$; $m \rightarrow n$ i zamenom nađenih komutatora u jednačinu kretanja

$$-M\omega^2 G_{\vec{n},\vec{m}}^\alpha(\omega) = -\frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{\vec{n},\vec{m}} + \frac{1}{i\hbar} \langle\langle [p_{\alpha;\vec{n}}, H] \mid u_{\alpha;\vec{m}} \rangle\rangle_\omega \quad (6.4)$$

za Grinove funkcije

$$G_{\vec{n},\vec{m}}^\alpha \equiv G_{n_x,n_y,n_z;m_x,m_y,m_z}^\alpha = \langle\langle u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} \mid u_{\alpha;m_x,m_y,m_z} \rangle\rangle ,$$

dobija se sledeći sistem diferencnih jednačina:

$$1. \ n_z = 0$$

$$\bullet \ n_y = 0$$

$$\circ \ n_x = 0$$

$$\left[\left(\frac{\omega}{\Omega_\alpha} \right)^2 - (6 + 3\varepsilon) \right] G_{0,0,0} + G_{1,0,0} + G_{0,1,0} + G_{0,0,1} = \mathcal{K}_{0,0,0} ,$$

$$\circ \ 1 \leq n_x \leq N_x - 1$$

$$\begin{aligned} \left[\left(\frac{\omega}{\Omega_\alpha} \right)^2 - (6 + 2\varepsilon) \right] G_{n_x,0,0} &+ G_{n_x+1,0,0} + G_{n_x-1,0,0} + G_{0,1,0} + \\ &+ G_{0,0,1} = \mathcal{K}_{n_x,0,0} , \end{aligned}$$

$$\circ \ n_x = N_x$$

$$\left[\left(\frac{\omega}{\Omega_\alpha} \right)^2 - (6 + 3\varepsilon) \right] G_{N_x,0,0} + G_{N_x-1,0,0} + G_{N_x,1,0} + G_{N_x,0,1} = \mathcal{K}_{N_x,0,0} ,$$

$$\bullet \ 1 \leq n_y \leq N_y - 1$$

$$\circ \ n_x = 0$$

$$\begin{aligned} \left[\left(\frac{\omega}{\Omega_\alpha} \right)^2 - (6 + 2\varepsilon) \right] G_{0,n_y,0} &+ G_{0,n_y+1,0} + G_{0,n_y-1,0} + G_{1,n_y,0} + \\ &+ G_{0,n_y,1} = \mathcal{K}_{0,n_y,0}, \end{aligned}$$

$$\circ \ 1 \leq n_x \leq N_x - 1$$

$$\begin{aligned} \left[\left(\frac{\omega}{\Omega_\alpha} \right)^2 - (6 + \varepsilon) \right] G_{n_x,n_y,0} &+ G_{n_x+1,n_y,0} + G_{n_x-1,n_y,0} + G_{n_x,n_y+1,0} + \\ &+ G_{n_x,n_y-1,0} + G_{n_x,n_y,1} = \mathcal{K}_{n_x,n_y,0}, \end{aligned}$$

$$\circ \ n_x = N_x$$

$$\begin{aligned} \left[\left(\frac{\omega}{\Omega_\alpha} \right)^2 - (6 + 2\varepsilon) \right] G_{N_x,n_y,0} &+ G_{N_x,n_y+1,0} + G_{N_x,n_y-1,0} + G_{N_x-1,n_y,0} + \\ &+ G_{N_x,n_y,1} = \mathcal{K}_{N_x,n_y,0}, \end{aligned}$$

$$\bullet \ n_y = N_y$$

$$\circ \ n_x = 0$$

$$\left[\left(\frac{\omega}{\Omega_\alpha} \right)^2 - (6 + 3\varepsilon) \right] G_{0,N_y,0} + G_{1,N_y,0} + G_{0,N_y-1,0} + G_{0,N_y,1} = \mathcal{K}_{0,N_y,0},$$

$$\circ \ 1 \leq n_x \leq N_x - 1$$

$$\begin{aligned} \left[\left(\frac{\omega}{\Omega_\alpha} \right)^2 - (6 + 2\varepsilon) \right] G_{n_x,N_y,0} &+ G_{n_x+1,N_y,0} + G_{n_x-1,N_y,0} + G_{n_x,N_y-1,0} + \\ &+ G_{n_x,N_y,1} = \mathcal{K}_{n_x,N_y,0}, \end{aligned}$$

$$\circ \ n_x = N_x$$

$$\begin{aligned} \left[\left(\frac{\omega}{\Omega_\alpha} \right)^2 - (6 + 3\varepsilon) \right] G_{N_x,N_y,0} &+ G_{N_x-1,N_y,0} + G_{N_x,N_y-1,0} + \\ &+ G_{N_x,N_y,1} = \mathcal{K}_{N_x,N_y,0}, \end{aligned}$$

$$2. \ 1 \leq n_z \leq N_z - 1$$

$$\bullet \ n_y = 0$$

$$\circ \ n_x = 0$$

$$\begin{aligned} \left[\left(\frac{\omega}{\Omega_\alpha} \right)^2 - (6 + 2\varepsilon) \right] G_{0,0,n_z} &+ G_{1,0,n_z} + G_{0,1,n_z} + G_{0,0,n_z+1} + \\ &+ G_{0,0,n_z-1} = \mathcal{K}_{0,0,n_z}, \end{aligned}$$

$$\circ \ 1 \leq n_x \leq N_x - 1$$

$$\begin{aligned} \left[\left(\frac{\omega}{\Omega_\alpha} \right)^2 - (6 + \varepsilon) \right] G_{n_x,0,n_z} &+ G_{n_x+1,0,n_z} + G_{n_x-1,0,n_z} + G_{n_x,1,n_z} + \\ &+ G_{n_x,0,n_z+1} + G_{n_x,0,n_z-1} = \mathcal{K}_{n_x,0,n_z}, \end{aligned}$$

- $n_x = N_x$

$$\begin{aligned} \left[\left(\frac{\omega}{\Omega_\alpha} \right)^2 - (6 + 2\varepsilon) \right] G_{N_x,0,n_z} &+ G_{N_x-1,0,n_z} + G_{N_x,1,n_z} + G_{N_x,0,n_z+1} + \\ &+ G_{N_x,0,n_z-1} = \mathcal{K}_{N_x,0,n_z}, \end{aligned}$$
- $1 \leq n_y \leq N_y - 1$
 - $n_x = 0$

$$\begin{aligned} \left[\left(\frac{\omega}{\Omega_\alpha} \right)^2 - (6 + \varepsilon) \right] G_{0,n_y,n_z} &+ G_{1,n_y,n_z} + G_{0,n_y+1,n_z} + G_{0,n_y-1,n_z} + \\ &+ G_{0,n_y,n_z+1} + G_{0,n_y,n_z-1} = \mathcal{K}_{0,n_y,n_z}, \end{aligned}$$
 - $1 \leq n_x \leq N_x - 1$

$$\begin{aligned} \left[\left(\frac{\omega}{\Omega_\alpha} \right)^2 - 6 \right] G_{n_x,n_y,n_z} &+ G_{n_x+1,n_y,n_z} + G_{n_x-1,n_y,n_z} + \\ &+ G_{n_x,n_y+1,n_z} + G_{n_x,n_y-1,n_z} + \\ &+ G_{n_x,n_y,n_z+1} + G_{n_x,n_y,n_z-1} = \\ &= \mathcal{K}_{n_x,n_y,n_z}, \end{aligned} \tag{6.5}$$
 - $n_x = N_x$

$$\begin{aligned} \left[\left(\frac{\omega}{\Omega_\alpha} \right)^2 - (6 + \varepsilon) \right] G_{N_x,n_y,n_z} &+ G_{N_x-1,n_y,n_z} + G_{N_x,n_y+1,n_z} + G_{N_x,n_y-1,n_z} + \\ &+ G_{N_x,n_y,n_z+1} + G_{N_x,n_y,n_z-1} = \mathcal{K}_{N_x,n_y,n_z}, \end{aligned}$$
- $n_y = N_y$
 - $n_x = 0$

$$\begin{aligned} \left[\left(\frac{\omega}{\Omega_\alpha} \right)^2 - (6 + 2\varepsilon) \right] G_{0,N_y,n_z} &+ G_{1,N_y,n_z} + G_{0,N_y-1,n_z} + G_{0,N_y,n_z+1} + \\ &+ G_{0,N_y,n_z-1} = \mathcal{K}_{0,N_y,n_z}, \end{aligned}$$
 - $1 \leq n_x \leq N_x - 1$

$$\begin{aligned} \left[\left(\frac{\omega}{\Omega_\alpha} \right)^2 - (6 + \varepsilon) \right] G_{n_x,N_y,n_z} &+ G_{n_x+1,N_y,n_z} + G_{n_x-1,N_y,n_z} + \\ &+ G_{n_x,N_y-1,n_z} + G_{n_x,N_y,n_z+1} + \\ &+ G_{n_x,N_y,n_z-1} = \mathcal{K}_{n_x,N_y,n_z}, \end{aligned}$$
 - $n_x = N_x$

$$\begin{aligned} \left[\left(\frac{\omega}{\Omega_\alpha} \right)^2 - (6 + 2\varepsilon) \right] G_{N_x,N_y,n_z} &+ G_{N_x-1,N_y,n_z} + G_{N_x,N_y-1,n_z} + G_{N_x,N_y,n_z+1} + \\ &+ G_{N_x,N_y,n_z-1} = \mathcal{K}_{N_x,N_y,n_z}, \end{aligned}$$
- 3. $n_z = N_z$

- $n_y = 0$

- $n_x = 0$

$$\left[\left(\frac{\omega}{\Omega_\alpha} \right)^2 - (6 + 2\varepsilon + \gamma) \right] G_{0,0,N_z} + G_{1,0,N_z} + G_{0,1,N_z} + G_{0,0,N_z-1} = \mathcal{K}_{0,0,N_z},$$

- $1 \leq n_x \leq N_x - 1$

$$\begin{aligned} \left[\left(\frac{\omega}{\Omega_\alpha} \right)^2 - (6 + \varepsilon + \gamma) \right] G_{n_x,0,N_z} &+ G_{n_x+1,0,N_z} + G_{n_x-1,0,N_z} + G_{n_x,1,N_z} + \\ &+ G_{n_x,0,N_z-1} = \mathcal{K}_{n_x,0,N_z}, \end{aligned}$$

- $n_x = N_x$

$$\begin{aligned} \left[\left(\frac{\omega}{\Omega_\alpha} \right)^2 - (6 + 2\varepsilon + \gamma) \right] G_{N_x,0,N_z} &+ G_{N_x-1,0,N_z} + G_{N_x,1,N_z} + \\ &+ G_{N_x,0,N_z-1} = \mathcal{K}_{N_x,0,N_z}, \end{aligned}$$

- $1 \leq n_y \leq N_y - 1$

- $n_x = 0$

$$\begin{aligned} \left[\left(\frac{\omega}{\Omega_\alpha} \right)^2 - (6 + \varepsilon + \gamma) \right] G_{0,n_y,N_z} &+ G_{1,n_y,N_z} + G_{0,n_y+1,N_z} + G_{0,n_y-1,N_z} + \\ &+ G_{0,n_y,N_z-1} = \mathcal{K}_{0,n_y,N_z}, \end{aligned}$$

- $1 \leq n_x \leq N_x - 1$

$$\begin{aligned} \left[\left(\frac{\omega}{\Omega_\alpha} \right)^2 - (6 + \gamma) \right] G_{n_x,n_y,N_z} &+ G_{n_x+1,n_y,N_z} + G_{n_x-1,n_y,N_z} + G_{n_x,n_y+1,N_z} + \\ &+ G_{n_x,n_y-1,N_z} + G_{n_x,n_y,N_z-1} = \mathcal{K}_{n_x,n_y,N_z}, \end{aligned}$$

- $n_x = N_x$

$$\begin{aligned} \left[\left(\frac{\omega}{\Omega_\alpha} \right)^2 - (6 + \varepsilon + \gamma) \right] G_{N_x,n_y,N_z} &+ G_{N_x-1,n_y,N_z} + G_{N_x,n_y+1,N_z} + G_{N_x,n_y-1,N_z} + \\ &+ G_{N_x,n_y,N_z-1} = \mathcal{K}_{N_x,n_y,N_z}, \end{aligned}$$

- $n_y = N_y$

- $n_x = 0$

$$\begin{aligned} \left[\left(\frac{\omega}{\Omega_\alpha} \right)^2 - (6 + 2\varepsilon + \gamma) \right] G_{0,N_y,N_z} &+ G_{1,N_y,N_z} + G_{0,N_y-1,N_z} + \\ &+ G_{0,N_y,N_z-1} = \mathcal{K}_{0,N_y,N_z}, \end{aligned}$$

- $1 \leq n_x \leq N_x - 1$

$$\begin{aligned} \left[\left(\frac{\omega}{\Omega_\alpha} \right)^2 - (6 + \varepsilon + \gamma) \right] G_{n_x,N_y,N_z} &+ G_{n_x+1,N_y,N_z} + G_{n_x-1,N_y,N_z} + G_{n_x,N_y-1,N_z} + \\ &+ G_{n_x,N_y,N_z-1} = \mathcal{K}_{n_x,N_y,N_z}, \end{aligned}$$

$$\circ \quad n_x = N_x$$

$$\begin{aligned} & \left[\left(\frac{\omega}{\Omega_\alpha} \right)^2 - (6 + 2\varepsilon + \gamma) \right] G_{N_x, N_y, N_z} + G_{N_x-1, N_y, N_z} + G_{N_x, N_y-1, N_z} + \\ & + G_{N_x, N_y, N_z-1} = \mathcal{K}_{N_x, N_y, N_z}. \end{aligned}$$

Ovde su:

$$G_{n_x, n_y, n_z; m_x, m_y, m_z}^\alpha(k_x; \omega) \equiv G_{n_x, n_y, n_z}; \quad \mathcal{K}_{n_x, n_y, n_z} = \frac{i\hbar}{2\pi C_\alpha} \delta_{n_x, n_y, n_z, m_x, m_y, m_z}; \quad \Omega_\alpha^2 = \frac{C_\alpha}{M}$$

(indeksi m_x , m_y i m_z su „parazitski” pa su ovde izbačeni). Prilikom izvođenja prethodnih izraza uzeto je u obzir: $u_{\alpha; \vec{n}} = 0 \Rightarrow G_{\vec{n}, \vec{m}}^\alpha = 0$ za $\forall n_x, y, z \notin [0, N_x, y, z]$.

Uvođenjem označke:

$$\varrho = \frac{\omega^2}{\Omega_\alpha^2} - 6,$$

prethodni sistem jednačina dobija oblik:

$$1. \quad n_z = 0$$

$$\bullet \quad n_y = 0$$

$$\circ \quad n_x = 0$$

$$(\varrho - 3\varepsilon) G_{0,0,0} + G_{1,0,0} + G_{0,1,0} + G_{0,0,1} = \mathcal{K}_{0,0,0},$$

$$\circ \quad 1 \leq n_x \leq N_x - 1$$

$$(\varrho - 2\varepsilon) G_{n_x, 0, 0} + G_{n_x+1, 0, 0} + G_{n_x-1, 0, 0} + G_{n_x, 1, 0} + G_{n_x, 0, 1} = \mathcal{K}_{n_x, 0, 0},$$

$$\circ \quad n_x = N_x$$

$$(\varrho - 3\varepsilon) G_{N_x, 0, 0} + G_{N_x-1, 0, 0} + G_{N_x, 1, 0} + G_{N_x, 0, 1} = \mathcal{K}_{N_x, 0, 0},$$

$$\bullet \quad 1 \leq n_y \leq N_y - 1$$

$$\circ \quad n_x = 0$$

$$(\varrho - 2\varepsilon) G_{0, n_y, 0} + G_{0, n_y+1, 0} + G_{0, n_y-1, 0} + G_{1, n_y, 0} + G_{0, n_y, 1} = \mathcal{K}_{0, n_y, 0},$$

$$\circ \quad 1 \leq n_x \leq N_x - 1$$

$$\begin{aligned} & (\varrho - \varepsilon) G_{n_x, n_y, 0} + G_{n_x+1, n_y, 0} + G_{n_x-1, n_y, 0} + G_{n_x, n_y+1, 0} + \\ & + G_{n_x, n_y-1, 0} + G_{n_x, n_y, 1} = \mathcal{K}_{n_x, n_y, 0}, \end{aligned}$$

$$\circ \quad n_x = N_x$$

$$\begin{aligned} & (\varrho - 2\varepsilon) G_{N_x, n_y, 0} + G_{N_x, n_y+1, 0} + G_{N_x, n_y-1, 0} + G_{N_x-1, n_y, 0} + \\ & + G_{N_x, n_y, 1} = \mathcal{K}_{N_x, n_y, 0}, \end{aligned}$$

$$\bullet \quad n_y = N_y$$

$$\circ \quad n_x = 0$$

$$(\varrho - 3\varepsilon) G_{0, N_y, 0} + G_{1, N_y, 0} + G_{0, N_y-1, 0} + G_{0, N_y, 1} = \mathcal{K}_{0, N_y, 0},$$

$$\circ \quad 1 \leq n_x \leq N_x - 1$$

$$\begin{aligned} (\varrho - 2\varepsilon) G_{n_x, N_y, 0} &+ G_{n_x+1, N_y, 0} + G_{n_x-1, N_y, 0} + G_{n_x, N_y-1, 0} + \\ &+ G_{n_x, N_y, 1} = \mathcal{K}_{n_x, N_y, 0}, \end{aligned}$$

$$\circ \quad n_x = N_x$$

$$(\varrho - 3\varepsilon) G_{N_x, N_y, 0} + G_{N_x-1, N_y, 0} + G_{N_x, N_y-1, 0} + G_{N_x, N_y, 1} = \mathcal{K}_{N_x, N_y, 0},$$

$$2. \quad 1 \leq n_z \leq N_z - 1$$

$$\bullet \quad n_y = 0$$

$$\circ \quad n_x = 0$$

$$(\varrho - 2\varepsilon) G_{0, 0, n_z} + G_{1, 0, n_z} + G_{0, 1, n_z} + G_{0, 0, n_z+1} + G_{0, 0, n_z-1} = \mathcal{K}_{0, 0, n_z},$$

$$\circ \quad 1 \leq n_x \leq N_x - 1$$

$$\begin{aligned} (\varrho - \varepsilon) G_{n_x, 0, n_z} &+ G_{n_x+1, 0, n_z} + G_{n_x-1, 0, n_z} + G_{n_x, 1, n_z} + \\ &+ G_{n_x, 0, n_z+1} + G_{n_x, 0, n_z-1} = \mathcal{K}_{n_x, 0, n_z}, \end{aligned}$$

$$\circ \quad n_x = N_x$$

$$\begin{aligned} (\varrho - 2\varepsilon) G_{N_x, 0, n_z} &+ G_{N_x-1, 0, n_z} + G_{N_x, 1, n_z} + G_{N_x, 0, n_z+1} + \\ &+ G_{N_x, 0, n_z-1} = \mathcal{K}_{N_x, 0, n_z}, \end{aligned}$$

$$\bullet \quad 1 \leq n_y \leq N_y - 1$$

$$\circ \quad n_x = 0$$

$$\begin{aligned} (\varrho - \varepsilon) G_{0, n_y, n_z} &+ G_{1, n_y, n_z} + G_{0, n_y+1, n_z} + G_{0, n_y-1, n_z} + \\ &+ G_{0, n_y, n_z+1} + G_{0, n_y, n_z-1} = \mathcal{K}_{0, n_y, n_z}, \end{aligned}$$

$$\circ \quad 1 \leq n_x \leq N_x - 1$$

$$\begin{aligned} \varrho G_{n_x, n_y, n_z} &+ G_{n_x+1, n_y, n_z} + G_{n_x-1, n_y, n_z} + G_{n_x, n_y+1, n_z} + \\ &+ G_{n_x, n_y-1, n_z} + G_{n_x, n_y, n_z+1} + G_{n_x, n_y, n_z-1} = \mathcal{K}_{n_x, n_y, n_z}, \quad (6.6) \end{aligned}$$

$$\circ \quad n_x = N_x$$

$$\begin{aligned} (\varrho - \varepsilon) G_{N_x, n_y, n_z} &+ G_{N_x-1, n_y, n_z} + G_{N_x, n_y+1, n_z} + G_{N_x, n_y-1, n_z} + \\ &+ G_{N_x, n_y, n_z+1} + G_{N_x, n_y, n_z-1} = \mathcal{K}_{N_x, n_y, n_z}, \end{aligned}$$

$$\bullet \quad n_y = N_y$$

$$\circ \quad n_x = 0$$

$$\begin{aligned} (\varrho - 2\varepsilon) G_{0, N_y, n_z} &+ G_{1, N_y, n_z} + G_{0, N_y-1, n_z} + G_{0, N_y, n_z+1} + \\ &+ G_{0, N_y, n_z-1} = \mathcal{K}_{0, N_y, n_z}, \end{aligned}$$

$$\circ \quad 1 \leq n_x \leq N_x - 1$$

$$\begin{aligned} (\varrho - \varepsilon) G_{n_x, N_y, n_z} &+ G_{n_x+1, N_y, n_z} + G_{n_x-1, N_y, n_z} + G_{n_x, N_y-1, n_z} + \\ &+ G_{n_x, N_y, n_z+1} + G_{n_x, N_y, n_z-1} = \mathcal{K}_{n_x, N_y, n_z}, \end{aligned}$$

$$\circ \ n_x = N_x$$

$$\begin{aligned} (\varrho - 2\varepsilon) G_{N_x, N_y, n_z} &+ G_{N_x-1, N_y, n_z} + G_{N_x, N_y-1, n_z} + G_{N_x, N_y, n_z+1} + \\ &+ G_{N_x, N_y, n_z-1} = \mathcal{K}_{N_x, N_y, n_z}, \end{aligned}$$

$$3. \ n_z = N_z$$

$$\bullet \ n_y = 0$$

$$\circ \ n_x = 0$$

$$\left[\varrho - (2\varepsilon + \gamma) \right] G_{0,0,N_z} + G_{1,0,N_z} + G_{0,1,N_z} + G_{0,0,N_z-1} = \mathcal{K}_{0,0,N_z},$$

$$\circ \ 1 \leq n_x \leq N_x - 1$$

$$\begin{aligned} \left[\varrho - (\varepsilon + \gamma) \right] G_{n_x, 0, N_z} &+ G_{n_x+1, 0, N_z} + G_{n_x-1, 0, N_z} + G_{n_x, 1, N_z} + \\ &+ G_{n_x, 0, N_z-1} = \mathcal{K}_{n_x, 0, N_z}, \end{aligned}$$

$$\circ \ n_x = N_x$$

$$\left[\varrho - (2\varepsilon + \gamma) \right] G_{N_x, 0, N_z} + G_{N_x-1, 0, N_z} + G_{N_x, 1, N_z} + G_{N_x, 0, N_z-1} = \mathcal{K}_{N_x, 0, N_z},$$

$$\bullet \ 1 \leq n_y \leq N_y - 1$$

$$\circ \ n_x = 0$$

$$\begin{aligned} \left[\varrho - (\varepsilon + \gamma) \right] G_{0, n_y, N_z} &+ G_{1, n_y, N_z} + G_{0, n_y+1, N_z} + G_{0, n_y-1, N_z} + \\ &+ G_{0, n_y, N_z-1} = \mathcal{K}_{0, n_y, N_z}, \end{aligned}$$

$$\circ \ 1 \leq n_x \leq N_x - 1$$

$$\begin{aligned} (\varrho - \gamma) G_{n_x, n_y, N_z} &+ G_{n_x+1, n_y, N_z} + G_{n_x-1, n_y, N_z} + G_{n_x, n_y+1, N_z} + \\ &+ G_{n_x, n_y-1, N_z} + G_{n_x, n_y, N_z-1} = \mathcal{K}_{n_x, n_y, N_z}, \end{aligned}$$

$$\circ \ n_x = N_x$$

$$\begin{aligned} \left[\varrho - (\varepsilon + \gamma) \right] G_{N_x, n_y, N_z} &+ G_{N_x-1, n_y, N_z} + G_{N_x, n_y+1, N_z} + G_{N_x, n_y-1, N_z} + \\ &+ G_{N_x, n_y, N_z-1} = \mathcal{K}_{N_x, n_y, N_z}, \end{aligned}$$

$$\bullet \ n_y = N_y$$

$$\circ \ n_x = 0$$

$$\begin{aligned} \left[\varrho - (2\varepsilon + \gamma) \right] G_{0, N_y, N_z} &+ G_{1, N_y, N_z} + G_{0, N_y-1, N_z} + \\ &+ G_{0, N_y, N_z-1} = \mathcal{K}_{0, N_y, N_z}, \end{aligned}$$

$$\circ \ 1 \leq n_x \leq N_x - 1$$

$$\begin{aligned} \left[\varrho - (\varepsilon + \gamma) \right] G_{n_x, N_y, N_z} &+ G_{n_x+1, N_y, N_z} + G_{n_x-1, N_y, N_z} + G_{n_x, N_y-1, N_z} + \\ &+ G_{n_x, N_y, N_z-1} = \mathcal{K}_{n_x, N_y, N_z}, \end{aligned}$$

$$\circ \quad n_x = N_x$$

$$\begin{aligned} & \left[\varrho - (2\varepsilon + \gamma) \right] G_{N_x, N_y, N_z} + G_{N_x-1, N_y, N_z} + G_{N_x, N_y-1, N_z} + \\ & + G_{N_x, N_y, N_z-1} = \mathcal{K}_{N_x, N_y, N_z}, \end{aligned}$$

što se može napisati u kompaktnoj formi:

$$\begin{aligned} & G_{n_x-1, n_y, n_z} + G_{n_x, n_y-1, n_z} + \\ & + G_{n_x, n_y, n_z-1} + \wp G_{n_x, n_y, n_z} + G_{n_x, n_y, n_z+1} + \\ & + G_{n_x, n_y+1, n_z} + G_{n_x+1, n_y, n_z} = \mathcal{K}_{n_x n_y n_z}, \end{aligned} \quad (6.7)$$

pri čemu je:

$$\wp = \left[\varrho - \varepsilon (\delta_{n_x, 0} + \delta_{n_x, N_x} + \delta_{n_y, 0} + \delta_{n_y, N_y} + \delta_{n_z, 0}) - \gamma \delta_{n_z, N_z} \right], \quad (6.8)$$

koja odražava njegov trodimenzionalni karakter (posebno po n_x , posebno po n_y i posebno po n_z) i sadrži ukupno $(N_x + 1) \times (N_y + 1) \times (N_z + 1)$ nepoznatih Grinovih funkcija. One mogu se izraziti u obliku:

$$G_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\mathcal{D}_{n_x, n_y, n_z}}{\mathcal{D}_{N_x+1, N_y+1, N_z+1}}, \quad (6.9)$$

gde $\mathcal{D}_{n_x, n_y, n_z}$ predstavlja odgovarajuću „zamensku” determinantu, a $\mathcal{D}_{N_x+1, N_y+1, N_z+1}$ – 3D kvadratnu determinantu sistema:

$$\mathcal{D}_{N_x+1, N_y+1, N_z+1} = \begin{vmatrix} \mathfrak{I} & I & O & \cdots & O & O & O \\ I & \mathcal{T} & I & \cdots & O & O & O \\ O & I & \mathcal{T} & \cdots & O & O & O \\ \cdot & \cdot & \cdot & \ddots & \cdot & \cdot & \cdot \\ O & O & O & \cdots & \mathcal{T} & I & O \\ O & O & O & \cdots & I & \mathcal{T} & I \\ O & O & O & \cdots & O & I & \mathfrak{I} \end{vmatrix}_{N_x+1}, \quad (6.10)$$

gde je:

$$\mathfrak{I} \equiv \mathfrak{I}_{N_y+1, N_z+1} = \begin{vmatrix} \mathfrak{R} & J & O & \cdots & O & O & O \\ J & \mathcal{R} & J & \cdots & O & O & O \\ O & J & \mathcal{R} & \cdots & O & O & O \\ \cdot & \cdot & \cdot & \ddots & \cdot & \cdot & \cdot \\ O & O & O & \cdots & \mathcal{R} & J & O \\ O & O & O & \cdots & J & \mathcal{R} & J \\ O & O & O & \cdots & O & J & \mathfrak{R} \end{vmatrix}_{N_y+1}, \quad (6.11)$$

$$\mathcal{T} \equiv \mathcal{T}_{N_y+1, N_z+1} = \begin{vmatrix} \mathcal{R} & O & O & \cdots & O & O & O \\ O & R & O & \cdots & O & O & O \\ O & O & R & \cdots & O & O & O \\ \cdot & \cdot & \cdot & \ddots & \cdot & \cdot & \cdot \\ O & O & O & \cdots & R & O & O \\ O & O & O & \cdots & O & R & O \\ O & O & O & \cdots & O & O & \mathcal{R} \end{vmatrix}_{N_y+1}, \quad (6.12)$$

$$I_{N_y+1, N_z+1} = \begin{bmatrix} J & O & O & \cdots & O & O & O \\ O & J & O & \cdots & O & O & O \\ O & O & J & \cdots & O & O & O \\ \cdot & \cdot & \cdot & \ddots & \cdot & \cdot & \cdot \\ O & O & O & \cdots & J & O & O \\ O & O & O & \cdots & O & J & O \\ O & O & O & \cdots & O & O & J \end{bmatrix}_{N_y+1}, \quad (6.13)$$

$$\mathfrak{R}_{N_z+1} = \begin{bmatrix} \varrho - 3\varepsilon & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & \varrho - 2\varepsilon & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \varrho - 2\varepsilon & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \ddots & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \varrho - 2\varepsilon & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & \varrho - 2\varepsilon & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & \varrho - (2\varepsilon + \gamma) \end{bmatrix}_{N_z+1}, \quad (6.14)$$

$$\mathcal{R}_{N_z+1} = \begin{bmatrix} \varrho - 2\varepsilon & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & \varrho - \varepsilon & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \varrho - \varepsilon & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \ddots & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \varrho - \varepsilon & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & \varrho - \varepsilon & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & \varrho - (\varepsilon + \gamma) \end{bmatrix}_{N_z+1}, \quad (6.15)$$

a:

$$R_{N_z+1} = \begin{bmatrix} \varrho - \varepsilon & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & \varrho & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \varrho & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \ddots & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \varrho & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & \varrho & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & \varrho - \gamma \end{bmatrix}_{N_z+1}, \quad (6.16)$$

 J je jedinična, a O nulta kvadratna matrica (obe reda $N_z + 1$).

6.3 Fononski spektri u kvantnoj tački

U slučaju modela slobodnih površina, kada se površinske perturbacije zanemaruju ($\varepsilon = \gamma = 0$), sistem jednačina (6.7) se svodi na:

$$1. \ n_z = 0$$

$$\bullet \ n_y = 0$$

$$\circ \ n_x = 0$$

$$\varrho G_{0,0,0} + G_{1,0,0} + G_{0,1,0} + G_{0,0,1} = \mathcal{K}_{0,0,0},$$

$$\circ \ 1 \leq n_x \leq N_x - 1$$

$$\varrho G_{n_x,0,0} + G_{n_x+1,0,0} + G_{n_x-1,0,0} + G_{n_x,1,0} + G_{n_x,0,1} = \mathcal{K}_{n_x,0,0},$$

$$\circ \ n_x = N_x$$

$$\varrho G_{N_x,0,0} + G_{N_x-1,0,0} + G_{N_x,1,0} + G_{N_x,0,1} = \mathcal{K}_{N_x,0,0} ,$$

$$\bullet \ 1 \leq n_y \leq N_y - 1$$

$$\circ \ n_x = 0$$

$$\varrho G_{0,n_y,0} + G_{0,n_y+1,0} + G_{0,n_y-1,0} + G_{1,n_y,0} + G_{0,n_y,1} = \mathcal{K}_{0,n_y,0} ,$$

$$\circ \ 1 \leq n_x \leq N_x - 1$$

$$\begin{aligned} \varrho G_{n_x,n_y,0} &+ G_{n_x+1,n_y,0} + G_{n_x-1,n_y,0} + G_{n_x,n_y+1,0} + \\ &+ G_{n_x,n_y-1,0} + G_{n_x,n_y,1} = \mathcal{K}_{n_x,n_y,0} , \end{aligned}$$

$$\circ \ n_x = N_x$$

$$\begin{aligned} \varrho G_{N_x,n_y,0} &+ G_{N_x,n_y+1,0} + G_{N_x,n_y-1,0} + G_{N_x-1,n_y,0} + \\ &+ G_{N_x,n_y,1} = \mathcal{K}_{N_x,n_y,0} , \end{aligned}$$

$$\bullet \ n_y = N_y$$

$$\circ \ n_x = 0$$

$$\varrho G_{0,N_y,0} + G_{1,N_y,0} + G_{0,N_y-1,0} + G_{0,N_y,1} = \mathcal{K}_{0,N_y,0} ,$$

$$\circ \ 1 \leq n_x \leq N_x - 1$$

$$\begin{aligned} \varrho G_{n_x,N_y,0} &+ G_{n_x+1,N_y,0} + G_{n_x-1,N_y,0} + G_{n_x,N_y-1,0} + \\ &+ G_{n_x,N_y,1} = \mathcal{K}_{n_x,N_y,0} , \end{aligned}$$

$$\circ \ n_x = N_x$$

$$\varrho G_{N_x,N_y,0} + G_{N_x-1,N_y,0} + G_{N_x,N_y-1,0} + G_{N_x,N_y,1} = \mathcal{K}_{N_x,N_y,0} ,$$

$$2. \ 1 \leq n_z \leq N_z - 1$$

$$\bullet \ n_y = 0$$

$$\circ \ n_x = 0$$

$$\varrho G_{0,0,n_z} + G_{1,0,n_z} + G_{0,1,n_z} + G_{0,0,n_z+1} + G_{0,0,n_z-1} = \mathcal{K}_{0,0,n_z} ,$$

$$\circ \ 1 \leq n_x \leq N_x - 1$$

$$\begin{aligned} \varrho G_{n_x,0,n_z} &+ G_{n_x+1,0,n_z} + G_{n_x-1,0,n_z} + G_{n_x,1,n_z} + \\ &+ G_{n_x,0,n_z+1} + G_{n_x,0,n_z-1} = \mathcal{K}_{n_x,0,n_z} , \end{aligned}$$

$$\circ \ n_x = N_x$$

$$\begin{aligned} \varrho G_{N_x,0,n_z} &+ G_{N_x-1,0,n_z} + G_{N_x,1,n_z} + G_{N_x,0,n_z+1} + \\ &+ G_{N_x,0,n_z-1} = \mathcal{K}_{N_x,0,n_z} , \end{aligned}$$

$$\bullet \ 1 \leq n_y \leq N_y - 1$$

$$\circ \ n_x = 0$$

$$\begin{aligned} \varrho G_{0,n_y,n_z} &+ G_{1,n_y,n_z} + G_{0,n_y+1,n_z} + G_{0,n_y-1,n_z} + \\ &+ G_{0,n_y,n_z+1} + G_{0,n_y,n_z-1} = \mathcal{K}_{0,n_y,n_z}, \end{aligned}$$

$$\circ \ 1 \leq n_x \leq N_x - 1$$

$$\begin{aligned} \varrho G_{n_x,n_y,n_z} &+ G_{n_x+1,n_y,n_z} + G_{n_x-1,n_y,n_z} + G_{n_x,n_y+1,n_z} + \\ &+ G_{n_x,n_y-1,n_z} + G_{n_x,n_y,n_z+1} + G_{n_x,n_y,n_z-1} = \mathcal{K}_{n_x,n_y,n_z}, \end{aligned}$$

$$\circ \ n_x = N_x$$

$$\begin{aligned} \varrho G_{N_x,n_y,n_z} &+ G_{N_x-1,n_y,n_z} + G_{N_x,n_y+1,n_z} + G_{N_x,n_y-1,n_z} + \\ &+ G_{N_x,n_y,n_z+1} + G_{N_x,n_y,n_z-1} = \mathcal{K}_{N_x,n_y,n_z}, \end{aligned}$$

$$\bullet \ n_y = N_y$$

$$\circ \ n_x = 0$$

$$\begin{aligned} \varrho G_{0,N_y,n_z} &+ G_{1,N_y,n_z} + G_{0,N_y-1,n_z} + G_{0,N_y,n_z+1} + \\ &+ G_{0,N_y,n_z-1} = \mathcal{K}_{0,N_y,n_z}, \end{aligned}$$

$$\circ \ 1 \leq n_x \leq N_x - 1$$

$$\begin{aligned} \varrho G_{n_x,N_y,n_z} &+ G_{n_x+1,N_y,n_z} + G_{n_x-1,N_y,n_z} + G_{n_x,N_y-1,n_z} + \\ &+ G_{n_x,N_y,n_z+1} + G_{n_x,N_y,n_z-1} = \mathcal{K}_{n_x,N_y,n_z}, \end{aligned}$$

$$\circ \ n_x = N_x$$

$$\begin{aligned} \varrho G_{N_x,N_y,n_z} &+ G_{N_x-1,N_y,n_z} + G_{N_x,N_y-1,n_z} + G_{N_x,N_y,n_z+1} + \\ &+ G_{N_x,N_y,n_z-1} = \mathcal{K}_{N_x,N_y,n_z}, \end{aligned}$$

$$3. \ n_z = N_z$$

$$\bullet \ n_y = 0$$

$$\circ \ n_x = 0$$

$$\varrho G_{0,0,N_z} + G_{1,0,N_z} + G_{0,1,N_z} + G_{0,0,N_z-1} = \mathcal{K}_{0,0,N_z},$$

$$\circ \ 1 \leq n_x \leq N_x - 1$$

$$\begin{aligned} \varrho G_{n_x,0,N_z} &+ G_{n_x+1,0,N_z} + G_{n_x-1,0,N_z} + G_{n_x,1,N_z} + \\ &+ G_{n_x,0,N_z-1} = \mathcal{K}_{n_x,0,N_z}, \end{aligned}$$

$$\circ \ n_x = N_x$$

$$\varrho G_{N_x,0,N_z} + G_{N_x-1,0,N_z} + G_{N_x,1,N_z} + G_{N_x,0,N_z-1} = \mathcal{K}_{N_x,0,N_z},$$

$$\bullet \ 1 \leq n_y \leq N_y - 1$$

$$\circ \ n_x = 0$$

$$\begin{aligned} \varrho G_{0,n_y,N_z} &+ G_{1,n_y,N_z} + G_{0,n_y+1,N_z} + G_{0,n_y-1,N_z} + \\ &+ G_{0,n_y,N_z-1} = \mathcal{K}_{0,n_y,N_z}, \end{aligned}$$

$$\circ \quad 1 \leq n_x \leq N_x - 1$$

$$\begin{aligned} \varrho G_{n_x, n_y, N_z} &+ G_{n_x+1, n_y, N_z} + G_{n_x-1, n_y, N_z} + G_{n_x, n_y+1, N_z} + \\ &+ G_{n_x, n_y-1, N_z} + G_{n_x, n_y, N_z-1} = \mathcal{K}_{n_x, n_y, N_z}, \end{aligned}$$

$$\circ \quad n_x = N_x$$

$$\begin{aligned} \varrho G_{N_x, n_y, N_z} &+ G_{N_x-1, n_y, N_z} + G_{N_x, n_y+1, N_z} + G_{N_x, n_y-1, N_z} + \\ &+ G_{N_x, n_y, N_z-1} = \mathcal{K}_{N_x, n_y, N_z}, \end{aligned}$$

$$\bullet \quad n_y = N_y$$

$$\circ \quad n_x = 0$$

$$\varrho G_{0, N_y, N_z} + G_{1, N_y, N_z} + G_{0, N_y-1, N_z} + G_{0, N_y, N_z-1} = \mathcal{K}_{0, N_y, N_z},$$

$$\circ \quad 1 \leq n_x \leq N_x - 1$$

$$\begin{aligned} \varrho G_{n_x, N_y, N_z} &+ G_{n_x+1, N_y, N_z} + G_{n_x-1, N_y, N_z} + G_{n_x, N_y-1, N_z} + \\ &+ G_{n_x, N_y, N_z-1} = \mathcal{K}_{n_x, N_y, N_z}, \end{aligned}$$

$$\circ \quad n_x = N_x$$

$$\varrho G_{N_x, N_y, N_z} + G_{N_x-1, N_y, N_z} + G_{N_x, N_y-1, N_z} + G_{N_x, N_y, N_z-1} = \mathcal{K}_{N_x, N_y, N_z}.$$

odnosno:

$$\begin{aligned} G_{n_x-1, n_y, n_z} &+ G_{n_x, n_y-1, n_z} + \\ G_{n_x, n_y, n_z-1} &+ \varrho G_{n_x, n_y, n_z} + G_{n_x, n_y, n_z+1} + \\ &+ G_{n_x, n_y+1, n_z} + G_{n_x+1, n_y, n_z} = \mathcal{K}_{n_x, n_y, n_z}, \end{aligned} \quad (6.17)$$

što se može predstaviti u obliku:

$$G_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\mathcal{D}_{n_x, n_y, n_z}}{\mathcal{D}_{N_x+1, N_y+1, N_z+1}}, \quad (6.18)$$

gde je:

$$\mathcal{D}_{N_x+1, N_y+1, N_z+1} = \begin{vmatrix} \mathcal{T} & I & O & \cdots & O & O & O \\ I & \mathcal{T} & I & \cdots & O & O & O \\ O & I & \mathcal{T} & \cdots & O & O & O \\ \cdot & \cdot & \cdot & \ddots & \cdot & \cdot & \cdot \\ O & O & O & \cdots & \mathcal{T} & I & O \\ O & O & O & \cdots & I & \mathcal{T} & I \\ O & O & O & \cdots & O & I & \mathcal{T} \end{vmatrix}_{N_x+1}, \quad (6.19)$$

$$\mathcal{T}_{N_y+1, N_z+1} = \begin{vmatrix} R & O & O & \cdots & O & O & O \\ O & R & O & \cdots & O & O & O \\ O & O & R & \cdots & O & O & O \\ \cdot & \cdot & \cdot & \ddots & \cdot & \cdot & \cdot \\ O & O & O & \cdots & R & O & O \\ O & O & O & \cdots & O & R & O \\ O & O & O & \cdots & O & O & R \end{vmatrix}_{N_y+1}, \quad (6.20)$$

$$I_{N_y+1, N_z+1} = \begin{bmatrix} J & O & O & \cdots & O & O & O \\ O & J & O & \cdots & O & O & O \\ O & O & J & \cdots & O & O & O \\ \cdot & \cdot & \cdot & \ddots & \cdot & \cdot & \cdot \\ O & O & O & \cdots & J & O & O \\ O & O & O & \cdots & O & J & O \\ O & O & O & \cdots & O & O & J \end{bmatrix}_{N_y+1}, \quad (6.21)$$

a:

$$R_{N_z+1} = \begin{bmatrix} \varrho & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & \varrho & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \varrho & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \ddots & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \varrho & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & \varrho & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & \varrho \end{bmatrix}_{N_z+1}. \quad (6.22)$$

Dozvoljene fononske energije u kvantnim tačkama određuju se na osnovu uslova:

$$\mathcal{D}_{N_x+1, N_y+1, N_z+1}(\varrho) \equiv 0, \quad (6.23)$$

što se svodi na rešavanje jednačina:

$$D_{N_x+1} \equiv 0; \quad T_{N_y+1} \equiv 0; \quad R_{N_z+1} \equiv 0, \quad (6.24)$$

na osnovu čega sledi:

$$\varrho_\chi = -2 \cos ak_x(\chi); \quad k_x(\chi) = \frac{\pi}{a} \frac{\chi}{N_x+2}; \quad \chi = 1, 2, \dots, N_x + 1, \quad (6.25)$$

$$\varrho_\mu = -2 \cos ak_y(\mu); \quad k_y(\mu) = \frac{\pi}{a} \frac{\mu}{N_y+2}; \quad \mu = 1, 2, \dots, N_y + 1, \quad (6.26)$$

$$\varrho_\nu = -2 \cos ak_z(\nu); \quad k_z(\nu) = \frac{\pi}{a} \frac{\nu}{N_z+2}; \quad \nu = 1, 2, \dots, N_z + 1. \quad (6.27)$$

S obzirom da je:

$$\varrho \equiv \varrho_{\chi, \nu, \mu} = \varrho_\chi + \varrho_\nu + \varrho_\mu = \frac{\omega^2}{\Omega_\alpha^2} - 6, \quad (6.28)$$

proizilazi da se zakon disperzije fonona u kvantnim tačkama može prikazati u obliku:

$$\mathcal{E}_k^\alpha = 2 \sqrt{\sin^2 \frac{ak_x(\chi)}{2} + \sin^2 \frac{ak_y(\mu)}{2} + \sin^2 \frac{ak_z(\nu)}{2}}, \quad (6.29)$$

koji je po formi isti kao kod neograničenih kristalnih struktura, tankih kristalnih filmova, superrešetki i kvantnih žica. Razlika se sastoji u tome što je kvaziimpuls fonona u kvantnim tačkama izrazito diskretan u sva tri kristalografska pravca.

Minimalna frekvencija dobija se za $k_x \rightarrow k_x^{min}(\chi = 1) = \frac{\pi}{a} \frac{1}{N_x+2}$, $k_y \rightarrow k_y^{min}(\mu = 1) = \frac{\pi}{a} \frac{1}{N_y+2}$ i $k_z \rightarrow k_z^{min}(\nu = 1) = \frac{\pi}{a} \frac{1}{N_z+2}$ i iznosi:

$$\begin{aligned} \omega_\alpha^{min} &= 2 \Omega_\alpha \sqrt{\sin^2 \frac{\pi}{2(N_x+2)} + \sin^2 \frac{\pi}{2(N_y+2)} + \sin^2 \frac{\pi}{2(N_z+2)}} = \\ &= 2 \frac{v}{a} \sqrt{\sin^2 \frac{\pi}{2(N_x+2)} + \sin^2 \frac{\pi}{2(N_y+2)} + \sin^2 \frac{\pi}{2(N_z+2)}}. \end{aligned} \quad (6.30)$$

Takođe se uočava da je minimalna energija fonona različita od nule i data je izrazom:

$$\Delta_{min} = \mathcal{E}_{\vec{k}_{min}}^\alpha = \mathcal{E}_{k_x^{min}, k_y^{min}, k_z^{min}}^\alpha = 2 \sqrt{\sin^2 \frac{ak_x^{min}(\chi)}{2} + \sin^2 \frac{ak_y^{min}(\mu)}{2} + \sin^2 \frac{ak_z^{min}(\nu)}{2}} . \quad (6.31)$$

Poređenjem izraza (3.20), (5.25) i (6.31) za energijske geopolove u film-strukturama, kvantnim žicama i kvantnim tačkama, vidi se da svi oni zavise od dimenzija uzorka, ali da je ta zavisnost kod kvantnih tačaka najizraženija, jer ove strukture poseduju tri ograničenja. Sa povećanjem dimenzija uzorka geopolovi iščezavaju.

6.4 Gustina fononskih stanja

Prema usvojenom modelu, kvantna tačka predstavlja niskodimenzionu kristalnu strukturu unutar koje postoji potpuno konfiniranje nosilaca, tj. njihovo kretanje ograničeno je duž sva tri kristalografska pravca, te je¹⁸:

$$k_x \in \left[\frac{1}{N_x + 2} \cdot \frac{\pi}{a}, \frac{N_x + 1}{N_x + 2} \cdot \frac{\pi}{a} \right] \Rightarrow \Delta k_x = \frac{N_x}{N_x + 2} \cdot \frac{\pi}{a} ,$$

$$k_y \in \left[\frac{1}{N_y + 2} \cdot \frac{\pi}{a}, \frac{N_y + 1}{N_y + 2} \cdot \frac{\pi}{a} \right] \Rightarrow \Delta k_y = \frac{N_y}{N_y + 2} \cdot \frac{\pi}{a} ,$$

$$k_z \in \left[\frac{1}{N_z + 2} \cdot \frac{\pi}{a}, \frac{N_z + 1}{N_z + 2} \cdot \frac{\pi}{a} \right] \Rightarrow \Delta k_z = \frac{N_z}{N_z + 2} \cdot \frac{\pi}{a} ,$$

na osnovu čega se dobija:

$$V = \left\{ \begin{array}{l} \frac{4}{3} \pi (ak_D^d)^3 \\ a^3 \Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z \end{array} \right. \Rightarrow k_D^d = \sqrt[3]{\frac{3\pi^2}{4a^3}} \cdot \sqrt[3]{\frac{N_x}{N_x + 2} \cdot \frac{N_y}{N_y + 2} \cdot \frac{N_z}{N_z + 2}} \Rightarrow \\ \Rightarrow k_D^d = k_D^b \cdot \sqrt[3]{\frac{N_x}{2(N_x + 2)} \cdot \frac{N_y}{2(N_y + 2)} \cdot \frac{N_z}{2(N_z + 2)}} = k_D^f \cdot \sqrt[3]{\frac{N_x}{2(N_x + 2)} \cdot \frac{N_y}{2(N_y + 2)}} , \quad (6.32)$$

odnosno:

$$k_D^d = k_D^w \cdot \sqrt[3]{\frac{N_x}{2(N_x + 2)}} . \quad (6.33)$$

Odavde sledi da je: $k_D^d < k_D^w < k_D^f < k_D^b$.

Gustina fononskih stanja u kvantnoj tački iznosi:

$$\mathcal{D}_D^d(\omega) = \frac{3N_x^d N_y^d N_z^d a^3}{(2\pi)^3} \int_0^\pi \sin \theta \, d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{k_{min}}^{k_D^d} k^2 \, dk \delta(\omega - vk) = \frac{3N_x^d N_y^d N_z^d a^3}{2\pi^2} \cdot \frac{\omega^2}{v^3} \Rightarrow \\ \Rightarrow \mathcal{D}_D^d(\omega) = \frac{N_x^d N_y^d N_z^d a^3}{2\pi^2} \cdot \frac{\omega^2}{v^3} , \quad (6.34)$$

a Debajeva frekvencija se određuje iz uslova:

$$\int_{\omega_{min}}^{\omega_D} \mathcal{D}_D^d(\omega) \, d\omega = N \Rightarrow \frac{N_x^d N_y^d N_z^d a^3}{2\pi^2 v^3} \int_{\omega_{min}}^{\omega_D} \omega^2 \, d\omega = (N_x^d + 1)(N_y^d + 1)(N_z^d + 1) ,$$

¹⁸Indeks „d“ odnosi se na kvantnu tačku, dok je značenje ostalih indeksa definisano u ranijim poglavljima.

gde je:

$$\omega_{min} = 2 \frac{v}{a} \sqrt{\sin^2 \frac{\pi}{2(N_x^d + 2)} + \sin^2 \frac{\pi}{2(N_y^d + 2)} + \sin^2 \frac{\pi}{2(N_z^d + 2)}}.$$

Odavde sledi:

$$\begin{aligned} \omega_D^d &= \frac{\sqrt[3]{6\pi^2}}{a} v \cdot \left\{ \frac{N_x^d + 1}{N_x^d} \cdot \frac{N_y^d + 1}{N_y^d} \cdot \frac{N_z^d + 1}{N_z^d} + \frac{4}{3\pi^2} \cdot \left[\sin^2 \frac{\pi}{2(N_x^d + 2)} + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \sin^2 \frac{\pi}{2(N_y^d + 2)} + \sin^2 \frac{\pi}{2(N_z^d + 2)} \right]^{3/2} \right\}^{1/3}, \end{aligned} \quad (6.35)$$

odnosno:

$$\begin{aligned} \omega_D^d &= \omega_D^b \cdot \left\{ \frac{N_x^d + 1}{N_x^d} \cdot \frac{N_y^d + 1}{N_y^d} \cdot \frac{N_z^d + 1}{N_z^d} + \frac{4}{3\pi^2} \cdot \left[\sin^2 \frac{\pi}{2(N_x^d + 2)} + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \sin^2 \frac{\pi}{2(N_y^d + 2)} + \sin^2 \frac{\pi}{2(N_z^d + 2)} \right]^{3/2} \right\}^{1/3}. \end{aligned} \quad (6.36)$$

Upoređivanjem Debajevih frekvencija za balk, ultratanki film, kvantnu žicu i kvantnu tačku, može se zaključiti da je:

$$\omega_D^d > \omega_D^w > \omega_D^f > \omega_D^b.$$

Uzimajući, na primer, vrednosti $N_z^f = 2$, $N_y^w = N_z^w = 2$ i $N_x^d = N_y^d = N_z^d = 2$, jednačine (3.26), (5.28) i (6.36) daju: $\omega_D^d = 1,042 \cdot \omega_D^w = \omega_D^w = 1,313 \cdot \omega_D^f = 1,506 \cdot \omega_D^b$. Dakle, Debajeva frekvencija za kvantnu tačku ima veću vrednost od onih u žici, tankom filmu i u neograničenoj kristalnoj strukturi.

Traženjem odnosa gustine fononskih stanja u idealnoj strukturi i kvantnoj tački, i to upravo na Debajevim frekvencijama:

$$\frac{\mathcal{D}_D^d(\omega_D^d)}{\mathcal{D}_D^b(\omega_D^b)} = \frac{N_x^d N_y^d N_z^d}{N_x^b N_y^b N_z^b} \cdot \left(\frac{\omega_D^d}{\omega_D^b} \right)^2,$$

dobija se da je:

$$\begin{aligned} \frac{\mathcal{D}_D^d(\omega_D^d)}{\mathcal{D}_D^b(\omega_D^b)} &= \frac{N_x^d N_y^d N_z^d}{N_x^b N_y^b N_z^b} \cdot \left\{ \frac{N_x^d + 1}{N_x^d} \cdot \frac{N_y^d + 1}{N_y^d} \cdot \frac{N_z^d + 1}{N_z^d} + \frac{4}{3\pi^2} \cdot \left[\sin^2 \frac{\pi}{2(N_x^d + 2)} + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \sin^2 \frac{\pi}{2(N_y^d + 2)} + \sin^2 \frac{\pi}{2(N_z^d + 2)} \right]^{3/2} \right\}^{2/3}, \end{aligned} \quad (6.37)$$

odakle proizilazi:

$$\mathcal{D}_D^d(\omega_D^d) \ll \mathcal{D}_D^w(\omega_D^w) \ll \mathcal{D}_D^f(\omega_D^f) \ll \mathcal{D}_D^b(\omega_D^b),$$

odnosno, gustina fononskih stanja se drastično smanjuje pri redukciji dimenzija strukture.

6.5 Termodinamika kvantne tačke

Unutrašnja energija kvantne tačke izračunava se pomoću jednačine:

$$U_d = \int d\omega^d D(\omega^d) \langle n(\omega^d, T) \rangle \hbar \omega^d = \int_{\omega_{min}^d}^{\omega_D^d} d\omega^d \left(\frac{(\omega^d)^2 V}{2\pi^2 v^3} \right) \left(\frac{\hbar \omega^d}{e^{\frac{\hbar \omega^d}{k_B T}} - 1} \right)$$

iz koje se – na isti način kao što je to učinjeno za neograničene kristalne strukture, tanke filmove i kvantne žice – dobija da je:

$$U_d = 9N_d k_B T \left(\frac{T}{T_D^d} \right)^3 \int_{x_{min}^d}^{x_D^d} \frac{(x^d)^3}{e^{x^d} - 1} dx^d, \quad (6.38)$$

gde je: $N_d \equiv (N_x^d + 1)(N_y^d + 1)(N_z^d + 1)$, $x^d = \frac{\hbar \omega^d}{k_B T}$, $x_D^d = \frac{T_D^d}{T}$, $T_D^d = \frac{\hbar \omega_D^d}{k_B}$ i $x_{min}^d = \frac{\hbar \omega_{min}^d}{k_B T}$.

U slučaju visokih temperatura:

$$T \gg T_D^d = \frac{\hbar \omega_D^d}{k_B}$$

dobija se:

$$U_d = 3N_d k_B T \left(\frac{T}{T_D^d} \right)^3 \left[(x_D^d)^3 - (x_{min}^d)^3 \right] = 3N_d k_B T \left[1 - \left(\frac{\omega_{min}^d}{\omega_D^d} \right)^3 \right],$$

odnosno, na osnovu (6.30) i (6.35):

$$U_d = 3N_d k_B T \left\{ 1 - \left[1 + \frac{3\pi^2 \left(\frac{N_x^d + 1}{N_x^d} \cdot \frac{N_y^d + 1}{N_y^d} \cdot \frac{N_z^d + 1}{N_z^d} \right)}{4 \left[\sin^2 \frac{\pi}{2(N_x^d + 2)} + \sin^2 \frac{\pi}{2(N_y^d + 2)} + \sin^2 \frac{\pi}{2(N_z^d + 2)} \right]^{\frac{3}{2}}} \right]^{-1} \right\}. \quad (6.39)$$

Toplotna kapacitivnost kvantne žice se određuje diferenciranjem ovog izraza po temperaturi:

$$C_d = 3N_d k_B \left\{ 1 - \left[1 + \frac{3\pi^2 \left(\frac{N_x^d + 1}{N_x^d} \cdot \frac{N_y^d + 1}{N_y^d} \cdot \frac{N_z^d + 1}{N_z^d} \right)}{4 \left[\sin^2 \frac{\pi}{2(N_x^d + 2)} + \sin^2 \frac{\pi}{2(N_y^d + 2)} + \sin^2 \frac{\pi}{2(N_z^d + 2)} \right]^{\frac{3}{2}}} \right]^{-1} \right\}.$$

a toplotna kapacitivnost obračunata po jednoj elementarnoj celiji kristala iznosi:

$$C_d^* = 3k_B \left\{ 1 - \left[1 + \frac{3\pi^2 \left(\frac{N_x^d + 1}{N_x^d} \cdot \frac{N_y^d + 1}{N_y^d} \cdot \frac{N_z^d + 1}{N_z^d} \right)}{4 \left[\sin^2 \frac{\pi}{2(N_x^d + 2)} + \sin^2 \frac{\pi}{2(N_y^d + 2)} + \sin^2 \frac{\pi}{2(N_z^d + 2)} \right]^{\frac{3}{2}}} \right]^{-1} \right\}, \quad (6.40)$$

odnosno:

$$C_d^* = C_b^* \left\{ 1 - \left[1 + \frac{3\pi^2 \left(\frac{N_x^d + 1}{N_x^d} \cdot \frac{N_y^d + 1}{N_y^d} \cdot \frac{N_z^d + 1}{N_z^d} \right)}{4 \left[\sin^2 \frac{\pi}{2(N_x^d + 2)} + \sin^2 \frac{\pi}{2(N_y^d + 2)} + \sin^2 \frac{\pi}{2(N_z^d + 2)} \right]^{\frac{3}{2}}} \right]^{-1} \right\}. \quad (6.41)$$

Analizom dobijenog rezultata i njegovim upoređivanjem sa odgovarajućim za balk-strukture (2.36), ultratanke filmove (3.33) i kvantne žice (5.32) zaključuje se da topotna kapacitivnost kvantne tačke u visokotemperaturskoj oblasti ima nešto nižu vrednost. Na primer, u slučaju kvantne tačke sa $N_x^d = N_y^d = N_z^d = 2$ dobija se da je:

$$C_d^* = 0,997 \cdot C_w^* = 0,9934 \cdot C_f^* = 0,9885 \cdot C_b^*.$$

U granicama niskih temperatura, kada $x_D^d \rightarrow \infty$, izraz za unutrašnju energiju (6.38) postaje:

$$U_d = 9N_d k_B T \left(\frac{T}{T_D^d} \right)^3 \int_{x_{min}^d}^{\infty} \frac{(x^d)^3}{e^{x^d} - 1} dx^d, \quad (6.42)$$

što se može napisati u obliku:

$$\begin{aligned} U_d &= 9N_d k_B T \left(\frac{T}{T_D^d} \right)^3 \left[\int_0^{\infty} \frac{(x^d)^3}{e^{x^d} - 1} dx^d - \int_0^{x_{min}^d} \frac{(x^d)^3}{e^{x^d} - 1} dx^d \right] = \\ &= 9N_d k_B T \left(\frac{T}{T_D^d} \right)^3 \left[\frac{\pi^4}{15} - \int_0^{x_{min}^d} \frac{(x^d)^3}{e^{x^d} - 1} dx^d \right]. \end{aligned} \quad (6.43)$$

Na osnovu razvoja:

$$(e^t - 1)^{-1} = \sum_{j=1}^{\infty} e^{-jt},$$

prethodna jednačina dobija oblik:

$$U_d = 9N_d k_B T \left(\frac{T}{T_D^d} \right)^3 \left[\frac{\pi^4}{15} - \sum_{j=1}^{\infty} \int_0^{x_{min}^d} x_d^3 \cdot e^{-jx_d} dx_d \right]. \quad (6.44)$$

Integral iz ove relacije se rešava višestrukom parcijalnom integracijom, nakon čega se dobija:

$$U_d = 9N_d k_B \frac{T^4}{(T_D^d)^3} \left\{ \frac{\pi^4}{15} + \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{j} e^{-jx_{min}^d} \left[(x_{min}^d)^3 + \frac{3}{j} (x_{min}^d)^2 + \frac{6}{j^2} x_{min}^d + \frac{6}{j^3} \right] - \sum_{j=1}^{\infty} \frac{6}{j^4} \right\}. \quad (6.45)$$

Topotna kapacitivnost obračunata po jednoj elementarnoj celiji kristala iznosi:

$$\begin{aligned} C_d^* &= \frac{1}{N_d} \frac{\partial U_d}{\partial T} = \frac{12\pi^4}{5} k_B \left(\frac{T}{T_D^d} \right)^3 + 9k_B \left(\frac{T}{T_D^d} \right)^3 \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{j} e^{-jx_{min}^d} \cdot \left[\frac{1}{j} (x_{min}^d)^4 + \right. \\ &\quad \left. + \left(1 + \frac{3}{j^2} \right) (x_{min}^d)^3 + \frac{6}{j} \left(1 + \frac{1}{j^2} \right) (x_{min}^d)^2 + \frac{6}{j^2} \left(3 + \frac{1}{j^2} \right) x_{min}^d + \frac{24}{j^3} \right]. \end{aligned} \quad (6.46)$$

Uvodimo sledeće smene:

$$\frac{T}{T_D^b} \equiv \mathcal{T} \quad , \quad \frac{\omega_{min}^d}{\omega_D^b} \equiv \Delta_d \quad ,$$

$$\begin{aligned} \frac{\omega_D^d}{\omega_D^b} = & \left\{ \frac{N_x^d + 1}{N_x^d} \cdot \frac{N_y^d + 1}{N_y^d} \cdot \frac{N_z^d + 1}{N_z^d} + \frac{4}{3\pi^2} \cdot \left[\sin^2 \frac{\pi}{2(N_x^d + 2)} + \right. \right. \\ & \left. \left. + \sin^2 \frac{\pi}{2(N_y^d + 2)} + \sin^2 \frac{\pi}{2(N_z^d + 2)} \right]^{3/2} \right\}^{1/3} \equiv f(N_x, N_y, N_z) , \end{aligned} \quad (6.47)$$

na osnovu čega se može pisati:

$$\frac{T}{T_D^d} = \frac{\omega_D^b}{\omega_D^d} \cdot \mathcal{T} = \frac{\mathcal{T}}{f(N_x, N_y, N_z)} \quad , \quad x_{min}^d = \frac{T_D^d}{T} \cdot \frac{\omega_{min}^d}{\omega_D^d} = \frac{\Delta_d}{\mathcal{T}} ,$$

tako da jednačina (6.46) dobija oblik:

$$\begin{aligned} C_d^* = & \frac{12\pi^4}{5} k_B \frac{\mathcal{T}^3}{f^3(N_x, N_y, N_z)} + 9k_B \frac{1}{f^3(N_x, N_y, N_z)} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{j} e^{-j\frac{\Delta_d}{\mathcal{T}}} \cdot \left[\frac{1}{j} \frac{\Delta_d^4}{\mathcal{T}} + \right. \\ & \left. + \left(1 + \frac{3}{j^2} \right) \Delta_d^3 + \frac{6}{j} \left(1 + \frac{1}{j^2} \right) \Delta_d^2 \mathcal{T} + \frac{6}{j^2} \left(3 + \frac{1}{j^2} \right) \Delta_d \mathcal{T}^2 + \frac{24}{j^3} \mathcal{T}^3 \right] . \end{aligned} \quad (6.48)$$

Uvođenjem bezdimenzionog parametra $\mathcal{C}_d = \frac{C_d^*}{C_0}$, gde je $C_0 = \frac{12\pi^4}{5} k_B$, prethodna jednačina se svodi na:

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_d = & \frac{\mathcal{T}^3}{f^3(N_x, N_y, N_z)} + \frac{15}{4\pi^4} \frac{1}{f^3(N_x, N_y, N_z)} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{j} e^{-j\frac{\Delta_d}{\mathcal{T}}} \cdot \left[\frac{1}{j} \frac{\Delta_d^4}{\mathcal{T}} + \left(1 + \frac{3}{j^2} \right) \Delta_d^3 + \right. \\ & \left. + \frac{6}{j} \left(1 + \frac{1}{j^2} \right) \Delta_d^2 \mathcal{T} + \frac{6}{j^2} \left(3 + \frac{1}{j^2} \right) \Delta_d \mathcal{T}^2 + \frac{24}{j^3} \mathcal{T}^3 \right] , \end{aligned} \quad (6.49)$$

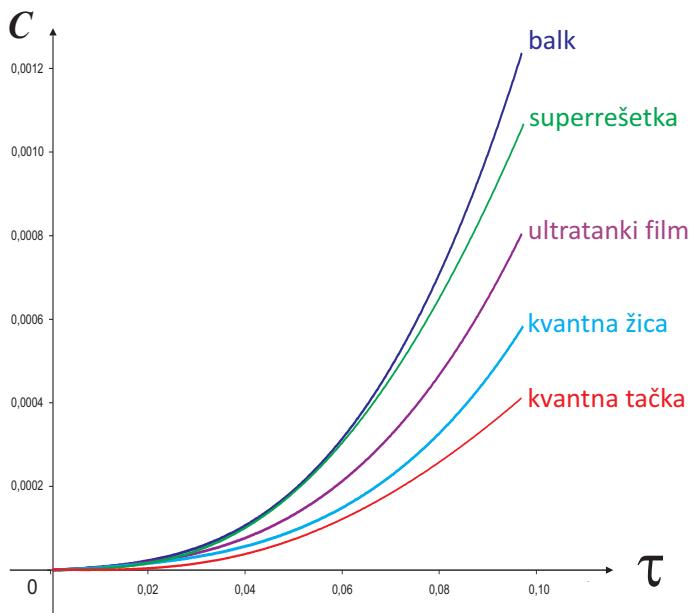
što se može izraziti preko tzv. Dajsonovih funkcija:

$$Z_r(x) = \sum_{j=1}^{\infty} j^{-r} e^{-jx}$$

na sledeći način:

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_d = & \frac{\mathcal{T}^3}{f^3(N_x, N_y, N_z)} + \frac{15}{4\pi^4} \frac{1}{f^3(N_x, N_y, N_z)} \left\{ \frac{\Delta_d^4}{\mathcal{T}} \cdot Z_2\left(\frac{\Delta_d}{\mathcal{T}}\right) + \Delta_d^3 \left[Z_1\left(\frac{\Delta_d}{\mathcal{T}}\right) + 3Z_3\left(\frac{\Delta_d}{\mathcal{T}}\right) \right] + \right. \\ & + 6\Delta_d^2 \mathcal{T} \left[Z_2\left(\frac{\Delta_d}{\mathcal{T}}\right) + Z_4\left(\frac{\Delta_d}{\mathcal{T}}\right) \right] + 6\Delta_d^2 \mathcal{T}^2 \left[3Z_3\left(\frac{\Delta_d}{\mathcal{T}}\right) + Z_5\left(\frac{\Delta_d}{\mathcal{T}}\right) \right] + \\ & \left. + 24\mathcal{T}^3 Z_4\left(\frac{\Delta_d}{\mathcal{T}}\right) \right\} . \end{aligned} \quad (6.50)$$

Na slici 6.4 prikazana je grafička zavisnost bezdimenzione toplotne kapacitivnosti kvantne tačke, žice, superrešetke, filma i balka od relativne temperature. Vidi se da je u niskotemperaturskoj oblasti toplotna kapacitivnost kvantne tačke niža nego kod drugih niskodimenzionih i tankslojnih struktura, kao i masivnih uzoraka.



Slika 6.4: Zavisnost bezdimenziione toplotne kapacitivnosti kvantne tačke, žice, filma, superrešetke i balka od relativne temperature u niskotemperaturskoj oblasti

Imajući u vidu prethodno dobijene rezultate za ultratanke filmove, superrešetke i kvantne žice, ovakva zavisnost toplotne kapacitivnosti kvantne tačke od temperature je očekivana [96–101], s obzirom da se kod ovih nanostruktura – usled povećanja veličine energijskog gepa – povećava i aktivaciona temperatura koju je neophodno dostići za pobuđivanje fononskog podsistema. Eksperimenti koji su poslednjih godina izvedeni sa ciljem određivanja toplotnog kapaciteta nanostruktura i njegovim upoređivanjem sa neograničenim kristalnim strukturama [103–104] pomalo su kontradiktorni i ne mogu se uzeti kao merodavni za potvrdu ili osporavanje navoda iznesenih u ovoj disertaciji iz nekoliko osnovnih razloga:

1. U disertaciji je pažnja posvećena isključivo idealnim strukturama, dok se eksperimenti sprovode na realnim uzorcima koji neminovno moraju sadržati atome primesa i nečistoća, što – u slučaju neiskodimenzionih sistema – obavezno unosi ogromne strukturne poremećaje, odnosno perturbacije i remeti fizičko-hemijske osobine strukture.
2. Radovi koji ukazuju na to da se toplotna kapacitivnost povećava sa smanjenjem dimenzija uzorka sprovedeni su isključivo na poluprovodničkim materijalima, dok je u ovoj disertaciji osnovni akcent bio na fononskom mehanizmu toplotnih pojava, što podrazumeva da su strukture na koje je ovde obraćana pažnja metalima slični materijali (iako oni na sobnim temperaturama mogu biti i dielektrici, kao što je npr. slučaj sa keramikama). Pored toga, eksperimenti se po pravilu izvode na nanočesticama, dok su u ovoj disertaciji razmatrane strukture sa izrazito pravilnim geometrijskim oblicima površina, s obzirom da je jedan od njenih osnovnih ciljeva ispitivanje uticaja koji na osobine materijala unose površinski efekti.
3. Prema navodima autora, na termodinamičko ponašanje nanostrukturnih materijala utiče veliki broj različitih faktora: gustina, termičko širenje materijala, čistoća uzorka, površinska apsorpcija, veličina uzorka („size-effect“) itd, pri čemu je za svaki nanostrukturni materijal posebno dominantan drugi efekat. Ovi autori sugerisu da je samo uz pažljivu i kompletну teorijsku i eksperimentalnu analizu pojedinačnih osobina nanostrukturnih materijala moguće analizirati termodinamičke osobine i ponašanje ispitivanih materijala, u kom cilju je neophodno izvršiti još mnogo teorijskih proračuna i razviti drugačije metode za njihovo eksperimentalno određivanje. U tom smislu, ova disertacija predstavlja skroman doprinos načinjen u pravcu realizacije tog cilja.

7 Zaključak

Ova disertacija posvećena je izučavanju uticaja efekta redukcije dimenzija na fizičke (prvenstveno termodinamičke) osobine nanoskopskih objekata. Tokom godina, mnogo napora učinjeno je da bi se ovaj efekat proučio i primenio na elektronske osobine niskodimenzionih struktura, imajući u vidu uticaj redukcije dimenzija na izmenu njihovih fizičkih, prvenstveno optičkih osobina. Fononi su postali interesantni relativno tek od skora, sa rastom interesovanja za proučavanjem elektron-fononskih interakcija na nano nivou, kada je postalo jasno da emisija fonona igra glavnu ulogu prilikom relaksacije nosilaca koja je, sa svoje strane, od suštinskog značaja za optoelektronske primene nanomaterijala. Simultana diskretizacija elektronskih i vibracionih stanja može snažno da utiče na spregu između elektrona i fonona. Kod poluprovodničkih kvantnih tačaka, na primer, teorijski model je predviđao da je usled kvantizacije elektronskih nivoa interakcija nosilaca sa akustičkim fononima blokirana (tzv. „efekat uskog grla“¹⁹). Još jedan motiv za proučavanje akustičkih fonona u nanostrukturama sastoji se u sticanju dodatnih saznanja o datom objektu: akustički normalni modovi povezani su sa geometrijom, tako da se merenjem njihovih frekvencija dobija informacija o posmatranoj strukturi. Pored toga, izučavanje načina na koji akustička energija napušta objekat daje dragocene informacije o njegovom okruženju. Na taj način, izučavanje fonona takođe omogućava dobijanje informacija o datom objektu. Fononi igraju odlučujuću ulogu pri prenošenju toplotne energije kod svih materijala, a posebno kod poluprovodnika i izolatora. Prostorno konfiniranje fonona u nanostrukturama može kako da utiče na fononske spektre a samim tim i na termodinamičke osobine na nano-nivou. Inženjeringom zakona disperzije fonona u nanostrukturama, može se očekivati da će transport toplotne energije biti kontrolisan na isti način kao što su nosioci kontrolisani u heterostrukturama usled inženjeringu međuzonskog gep-a.

Istražujući i upoređujući fononske spektre i termodinamičke osobine u idealnim neograničenim strukturama, ultratankim filmovima, superrešetkama, kvantnim žicama i kvantnim tačkama, došli smo do sledećih zaključaka.

1. Sprovedene analize su utvrdile postojanje bitnih razlika u zakonu disperzije fonona u ograničenim strukturama (ultratankim filmovima, superrešetkama, kvantnim žicama i kvantnim tačkama), kao isključivu posledicu postojanja granica te strukture.
2. Postojanje graničnih uslova ima za posledicu promenu energijske zone fonona. U odnosu na zonu dozvoljenih energija idealnih struktura sa praktično kontinualnim rasporedom, zona fononskih dozvoljenih energija u filmu je izrazito diskretna. Ona se sastoji od dvodimenzionalnih podzona. U svakoj od podzona energija uzima kontinualne vrednosti. Povećanjem broja slojeva filma povećava se broj diskretnih stanja unutar zone dozvoljenih energija. Kod kvantnih žica ova diskretnost je dvodimenziona – duž svih pravaca gde postoje granične površine, što znači da se kontinualnost podzona narušava i one dobijaju diskretan karakter, dok je kod kvantnih tačaka trodimenziona.
3. Sve tri akustičke frekvencije u masivnim strukturama teže nuli kada $k \equiv |\vec{k}| \rightarrow 0$, dok u nanostrukturama teže nekoj minimalnoj vrednosti koja zavisi od dimenzija objekta i obrnuto im je proporcionalna.
4. Postojanje minimalne energije potrebne za pobuđenje fonona u nanostrukturama i njoj odgovarajuće aktivacione temperature upućuju na zaključak da se ove strukture do te temperaturе ponašaju kao „zamrznuti sistemi“, tj. fononi u njima realno nisu prisutni (nema mehaničkih vibracija koje bi stvarale ovaj vid otpora električnoj struji).
5. Kao posledica narušenja translacione invarijantnosti duž jednog pravca kod superrešetki dolazi do cepanja energetske zone (koja je kao i kod neograničenih kristala kontinualna) na podzone razdvojene zabranjenim energijskim zonama.

¹⁹Engleski: phonon bottleneck effect

6. Fononska stanja u superrešetkama se sa porastom energije zgušnjavaju. U slučaju simetrične superrešetke sa istim atomima, disperzije grane se međusobno spajaju na granici prve Briluenove zone. U slučaju jače veze između slojeva superrešetke dolazi do potiskivanja energijskih nivoa unutar balkovske zone, a ako je veza između slojeva superrešetke slabija nivoi se istiskuju iznad nje.
7. Gustina fononskih stanja se drastično smanjuje pri redukciji dimenzija strukture, tj. ima mnogo manju vrednost u filmovima, a još manju u kvantnim žicama i kvantnim tačkama u poređenju sa neograničenim strukturama. To znači da se u ograničenim strukturama fononska pobuđenja slabije (sa manjim intenzitetom) javljaju. Debajeve frekvencije imaju nešto više vrednosti u kvantnim tačkama nego u kvantnim žicama i filmovima, što znači da je fononska zona izdignuta ka višim frekvencijama.
8. Na relativno niskim temperaturama topotna kapacitivnost ima niže vrednosti u tankim filmovima nego u masivnim uzorcima, što je u skladu sa činjenicom da je energija pobuđivanja fonona u filmu veća od one u balku. U slučaju kvantnih žica i tačaka ova razlika je još izraženija.
9. Termodinamičke funkcije i njima odgovarajuće karakteristike (topotna kapacitivnost) u superrešetkama na niskim temperaturama su manje od istih osobina masivnih struktura, ali su ipak dosta veće od onih u film-strukturama i kvantnim žicama.
10. Spektri fonona u film-strukturama, kvantnim žicama i kvantnim tačkama poseduju donji (kao i jedan gornji) energijski gep. Razlog postojanja donjeg energijskog gepa može da se tumači na sledeći način: on odgovara energiji osnovnog stanja fononskog sistema i predstavlja najmanju energiju koju treba uložiti da bi se u filmu pojavili akustički fononi (optičkog tipa). Sve do te energije (aktivacione temperature) fononi se mogu nalaziti samo u nekim od vezanih stanja, npr. sa elektronima u Kuperovim parovima. Do te temperature ceo sistem se ponaša kao zamrznut. U kvantnim žicama, a pogotovo u kvantnim tačkama, ovi kvantno-dimenzijski efekti, pa i aktivaciona temperatura, su znatno izraženiji - veći za preko 40 %.

Literatura

- [1] C.P.Poole Jr, F.J.Owens: Introduction To Nanotechnology, *John Wiley & Sons Ltd*, New Jersey 2003.
- [2] E.L.Wolf: Nanophysics and Nanotechnology, *Wiley-VCH*, Weinheim 2006.
- [3] R.W.Kelsall, I.W.Hamley, M.Geoghegan (Eds.): Nanoscale Science and Technology, *John Wiley & Sons Ltd*, Chichester 2005.
- [4] L.Matija, D.Kojić, A.Vasić, B.Bojović, T.Jovanović, Đ.Koruga: Uvod u nanotehnologije, *Nauka-Don Vas*, Beograd 2011.
- [5] Z.Ikonić i V.Milanović: Poluprovodničke kvantne mikrostrukture, *Univerzitet u Beogradu*, Beograd 1997.
- [6] M.Tadić: Poluprovodničke nanostrukture, *Zadužbina Andrejević*, Beograd 1999.
- [7] C.Delerue, M.Lannoo: Nanostructures - Theory and Modelling, *Springer*, Berlin Heidelberg 2009.
- [8] J.H.Davies: The physics of low-dimentional semiconductor – An Introduction, *University Press*, Cambridge 1998.
- [9] O.Manasreh: Semiconductor Heterojunctions and Nanostructures, *McGraw-Hill*, New York 2005.
- [10] M.Adachi, D.J.Lockwood (Eds.): Self-Organized Nanoscale Materials, *Springer Science+Business Media, Inc.*, New York 2006.
- [11] W.T.S.Huck (Ed.): Nanoscale Assembly – Chemical Techniques, *Springer Science+Business Media, Inc.*, New York 2005.
- [12] T.M.Nenadović i T.M.Pavlović: Fizika i tehnika tankih slojeva, *INN Vinča*, Beograd 1997.
- [13] H.Watanabe: The Physics and Fabrication of Microstructures, eds. by M.J.Kelly and C.Weisbuch, *Springer*, 158 (1986).
- [14] Nanostructure Physics and Fabrication, eds. by M.A.Reed and W.P.Kirk, *Academic*, Boston 1989.
- [15] A.G.Davies, J.M.T.Thompson (Eds.): Advances in Nanoengineering – Electronics, Materials and Assembly, *Imperial College Press*, London 2007.
- [16] É.Knystautas (Ed.): Engineering Thin Films and Nanostructures with Ion Beams, *CRC Press*, Boca Raton, FL (USA) 2005.
- [17] C.N.R.Rao, P.J.Thomas, G.U.Kulkarni: Nanocrystals: Synthesis, Properties and Applications, *Springer-Verlag*, Berlin Heidelberg 2007.
- [18] W.Zhou, Z.L.Wang (Eds.): Scanning Microscopy for Nanotechnology, *Springer Science+Business Media, LLC*, New York 2006.
- [19] P.Eaton, P.West: Atomic Force Microscopy, *University Press*, Oxford, 2010.
- [20] M.F.Crommie, C.P.Lutz and D.M. Eigler: Confinement of electrons to quantum corrals on a metallic surface, *Science* **262**, 218-220, 1993.
- [21] T.Heinzel: Mesoscopic Electronics in Solid State Nanostructures, *Wiley-VCH*, Weinheim 2007.
- [22] V.V.Moshchalkov, J.Fritzsche: Nanostructured Superconductors, *World Scientific Publishing*, Singapore 2011.
- [23] H.E.Schaefer: Nanoscience – The Science of the Small in Physics, Engineering, Chemistry, Biology and Medicine, *Springer-Verlag*, Berlin Heidelberg 2010.

- [24] M.Papić-Obradović, S.Miljković, L.Matija, J.Munćan, Dj.Koruga: Osnove nanomedicine, *Nauka-Don Vas*, Beograd 2011.
- [25] D.Raković: Osnovi biofizike, *IASC & IEFPG*, Beograd 2008.
- [26] E.Roduner: Nanoscopic Materials – Size-dependent Phenomena, *RSC Publishing*, Cambridge 2006.
- [27] Ž.A.Sastojević i Z.V.Popović: Elektrotehnički i elektronski materijali, *Promezia*, Beograd 1995.
- [28] J.A.Reissland: The Physics of Phonons, *John Wiley & Sons Ltd*, London, New York 1973.
- [29] M.A.Stroscio, M.Dutta: Phonons in Nanostructures, *University Press*, Cambridge 2004.
- [30] J.M.Ziman: Electrons and Phonons, *Oxford Science*, Oxford 1996.
- [31] B.K.Ridley: Electrons and Phonons in Semiconductor Multilayers, *University Press*, Cambridge 2009.
- [32] A.A.Maradudin: Theory of Lattice Dynamics in the Harmonic Approximation, *Academic Press*, New York 1968.
- [33] N.B.Brandt i S.M.Chudinov: Elektrony i fonony v metalah, *MGU*, Moskva 1980.
- [34] J.P.Wolfe: Imaging Phonons - Acoustic Wave Propagation in Solids, *University Press*, Cambridge 1998.
- [35] D.Raković: Fizičke osnove i karakteristike elektrotehničkih materijala, *Elektrotehnički fakultet*, Beograd 1997.
- [36] M.T.Dove: Introduction to Lattice Dynamics, *University Press*, Cambridge 1993.
- [37] B.Tošić, V.Sajfert, D.Popov, J.Šetrajčić, D.Ćirić: Primena diferencnog računa u analizi nanostruktura, *VANU*, Novi Sad 2005.
- [38] S.G.Davison and M.Steslicka: Basic Theory of Surface States, *Clarendon*, Oxford 1996.
- [39] M.Pruton: Introduction to Surface Physics, *Clarendon*, Oxford 1995.
- [40] M.G.Cottam and D.R.Tilley: Introduction to Surface and Superlattice Excitations, *Univ. Press*, Cambridge 1989.
- [41] L.C.Feldman and J.W.Mayer: Fundamentals of Surface and Thin Film Analysis, *North-Holland*, Amsterdam 1986.
- [42] J.P.Šetrajčić, D.I.Ilić, B.Markoski, A.J.Šetrajčić, S.M.Vučenović, D.Lj.Mirjanić, B.Škipina, S.Pelemiš: Adaption and Application of the Green Function Method to Research on Molecular Ultrathin Film Optical Properties, *Physica Scripta* T135 014043 (4pp) 2009.
- [43] C.S.S.R.Kumar (Ed.): Raman Spectroscopy for Nanomaterials Characterization, *Springer-Verlag*, Berlin Heidelberg 2012.
- [44] T.Ruf: Phonon Raman Scattering in Semiconductors, Quantum Wells and Superlattices, *Springer-Verlag*, Berlin Heidelberg 1998.
- [45] P.J.Larkin: Infrared and Raman Spectroscopy, *Elsevier*, 2011.
- [46] S.Doniach, E.H.Sondheimer: Green's Functions for Solid State Physicists, *Imperial College Press*, London 1999.
- [47] M.Reed, B.Simon: Methods of Modern Mathematical Physics Vol.2, *Academic Press*, San Diego 1975.
- [48] G.Rickayzen: Green's Functions and Condensed Matter, *Ac.Press*, London 1980.
- [49] E.N.Economou: Green's Functions in Quantum Physics, *Springer*, Berlin 1979.
- [50] D.S.Sondheimer: Green's Functions for Solid State Physics, *Benjamin*, New York 1974.

- [51] A.M.Kosevich: The Crystal Lattice, *Wiley-VCH*, Weinheim 2005.
- [52] U.Rössler: Solid State Theory – An Introduction, *Physica-Verlag*, Berlin Heidelberg 2009.
- [53] P.Y.Yu, M.Cardona: Fundamentals of Semiconductors – Physics and Materials Properties, Fourth Edition, *Springer*, Berlin Heidelberg 2010.
- [54] C.Kittel: Uvod u fiziku čvrstog stanja, *Savremena administracija*, Beograd 1970.
- [55] I.Supek: Teorijska fizika i struktura materije, *Školska knjiga*, Zagreb 1977.
- [56] V.Knapp i P.Colić: Uvod u električna i magnetna svojstva materijala, *Školska knjiga*, Zagreb 1997.
- [57] V.Šips: Uvod u fiziku čvrstog stanja, *Školska knjiga*, Zagreb 2003.
- [58] B.S.Tošić: Statistička fizika, *IF PMF*, Novi Sad 1978.
- [59] W.Jones and N.H.March: Theoretical Solid State Physics, *Dover*, New York 1985.
- [60] J.Callaway: Quantum Theory of the Solid State, *Academic Press*, New York 1974.
- [61] N.W.Ashcroft and N.D.Mermin: Solid State Physics, *Holt*, New York 1976.
- [62] A.S.Davydov: Teoriya tverdogo tela, *Nauka*, Moskva 1976.
- [63] A.I.Anseym: Vvedenie v teoriyu poluprovodnikov, *Nauka*, Moskva 1990.
- [64] J.D.Patterson, B.C.Bailey: Solid-State Physics, Introduction to the Theory, *Springer*, Berlin Heidelberg 2007.
- [65] D.I.Ilić: Termodinamičke osobine nanostrukturnih kristala (magistarska teza), *Elektrotehnički fakultet*, Beograd 2007.
- [66] S.K.Jaćimovski: Fononska termodinamika slojevitih nanostruktura (dr disertacija), *ETF*, Beograd 2003.
- [67] S.Lazarev: Teorijska istraživanja električnih i magnetnih svojstava tankih filmova (dr disertacija), *PMF*, Novi Sad 1997.
- [68] A.A.Abrikosov, L.P.Gorkov, I.E.Dzyaloshinskii: Metody kvantovoi teorii polja v statisticheskoi fizike, *FM*, Moskva 1962.
- [69] E.M.Lifshitz i L.P.Pitaevskii: Statisticheskaya fizika, *Nauka*, Moskva 1978.
- [70] Ch.Kittel: Statisticheskaya termodinamika, *Nauka*, Moskva 1977.
- [71] M.Kaviany: Heat Transfer Physics *University Press*, Cambridge 2008.
- [72] Z.M.Zhang: Nano-Microscale Heat Transfer *McGraw-Hill*, New York 2007.
- [73] S.Volz (Ed.): Thermal Nanosystems and Nanomaterials, *Springer*, Berlin Heidelberg 2009.
- [74] D.K.Ferry, S.M.Goodnick, J.Bird: Transport in Nanostructures, *University Press*, Cambridge 2009.
- [75] J.K.Freericks: Transport in Multilayered Nanostructures – The Dynamical Mean-Field Theory Approach *Imperial College Press*, London 2006.
- [76] Y.V.Nazarov, Y.M.Blanter: Quantum Transport – Introduction to Nanoscience, *University Press*, Cambridge 2009.
- [77] J.H.Fender (Ed.): Nanoparticles and Nanostructured Films - Preparation, Characterization and Applications, *Wiley-VCH*, Weinheim 1998.
- [78] H.C.Chang, E.A.Demekhin: Complex Wave Dynamics on Thin Films, *Elsevier*, Amsterdam 2002.
- [79] G.Decher, J.B.Schlenoff (Eds.): Multilayer Thin Films – Sequential Assembly of Nanocomposite Materials, *Wiley-VCH*, Weinheim 2003.

- [80] O.Stenzel: The Physics of Thin Film Optical Spectra - An Introduction, *Springer-Verlag*, Berlin Heidelberg 2005.
- [81] D.S.Mitrinović: Uvod u specijalne funkcije, *Gradjevinska knjiga*, Beograd 1972.
- [82] D.S.Mitrinović, D.Mihajlović i P.M.Vasić: Linearna algebra, polinomi, analitička geometrija, *Gradjevinska knjiga*, Beograd 1990.
- [83] R.Tsu: Superlattice to Nanoelectronics, *Elsevier*, Amsterdam 2005.
- [84] Z.W.Lu, B.M.Klein and A.Zunger, *Superlattices and Microstructures* **18**, 161 (1995).
- [85] P.Harrison: Quantum Wells, Wires and Dots, *John Wiley & Sons Ltd*, Chichester 2005.
- [86] S.N.Karmakar, S.K.Maiti, J.Chowdhury (Eds.): Physics of Zero- and One-Dimensional Nanoscopic Systems, *Springer-Verlag*, Berlin Heidelberg 2007.
- [87] Z.M.Wang (Ed.): One-Dimensional Nanostructures, *Springer Science+Business Media, LLC*, New York 2008.
- [88] C.N.R.Rao, A.Govindaraj: Nanotubes and Nanowires, *RSC Publishing*, Cambridge 2005.
- [89] P.J.Burke (Ed.): Nanotubes and Nanowires, *World Scientific Publishing*, Singapore 2007.
- [90] V.I.Klimov (Ed.): Nanocrystal Quantum Dots, *CRC Press* Boca Raton, FL 2010.
- [91] R.W.Knoss (Ed.): Quantum Dots - Research, Technology and Applications, *Nova Science Publishers*, New York 2009.
- [92] T.Chakraborty: Quantum Dots, *Elsevier*, 1999.
- [93] P.Michler (Ed.): Single Quantum Dots – Fundamentals, Applications, and New Concepts, *Springer-Verlag*, Berlin Heidelberg 2003.
- [94] A.L.Rogach (Ed.): Semiconductor Nanocrystal Quantum Dots, *Springer-Verlag*, Wien 2008.
- [95] E.Lipparini: Modern Many-Particle Physics – Atomic Gases, Quantum Dots and Quantum Fluids, *World Scientific Publishing*, Singapore 2003.
- [96] S.K.Jaćimovski, D.I.Ilić, I.K.Junger and J.P.Šetrajčić, *J.Math.* **31**, 55 Novi Sad 2001.
- [97] D.I.Ilić, S.M.Vučenović, S.K.Jaćimovski i J.P.Šetrajčić, *Zbornik 13. SFKM*, 76 2001.
- [98] J.P.Šetrajčić, S.K.Jaćimovski, D.Raković and D.I.Ilić: Phonon Spectra in Crystalline Nano-structures, *WSEAS Press*, (146-151) 2003.
- [99] D.I.Ilić, S.M.Vučenović, S.K.Jaćimovski, V.M.Zorić and J.P.Šetrajčić: Phonon Spectra and Thermodynamic Properties of Crystalline Nanowires, *Mater.Res.Soc. Symp.Proc.* **1017E**/DD08-50, (1-6) 2007.
- [100] D.I.Ilić, D.I.Raković i J.P.Šetrajčić: Fononski spektri u kvantnim žicama, *Hem.ind* 61/2, (51-54) 2007.
- [101] J.P.Šetrajčić, D.Lj.Mirjanić, S.M.Vučenović, D.I.Ilić, B.Markoski, S.K.Jaćimovski, V.D.Sajfert, V.M.Zorić: Phonon Contribution in Thermodynamics of Nano-Crystalline Films and Wires *Acta Physica Polonica A*, Vol.115 No.4, (778-782) 2009.
- [102] M.V.Satarić, D.I.Ilić, N.Ralević, J.A.Tuszynski: A Nonlinear Model of Ionic Wave Propagation along Microtubules *Eur Biophys J*, Vol.38 No.5, (637-647) 2009.
- [103] M.X.Gu, Chang Q.Sun, Z.Chen, T.C.Au Yeung, S.Li, C.M.Tan, and V.Nosik: Size, temperature, and bond nature dependence of elasticity and its derivatives on extensibility, Debye temperature, and heat capacity of nanostructures *PhysRevB*, 75, 125403 2007.
- [104] Zhi-Cheng Tan, Lan Wang, and Quan Shi: Study of heat capacity enhancement in some nanostructured materials *Pure Appl. Chem.*, Vol. 81, No. 10, pp. 18711880, 2009.



KRATKA BIOGRAFIJA

MR DUŠAN ILIĆ

Mr Dušan Ilić je rođen 05. 03. 1969. u Novom Sadu gde je završio osnovnu (OOŠ „Đorđe Natošević“) i srednju školu (Prirodno-matematička gimnazija „Jovan Jovanović Zmaj“). Prirodno-matematički fakultet u Novom Sadu – odsek za fiziku – upisao je 1987. i na njemu diplomirao 1999. godine. Školske 2002/03. godine upisao je postdiplomske studije na Elektrotehničkom fakultetu u Beogradu, koje je završio 31. 05. 2007, odbranivši magistarsku tezu pod naslovom „Termodinamičke osobine nanostruktturnih kristala“, čime je stekao akademski naziv magistra elektrotehničkih nauka za oblast elektrotehničkih materijala i tehnologija.

Od februara 2000. godine zaposlen je kao asistent-pripravnik, a od septembra 2007. kao asistent sa magistraturom na Katedri za fiziku Fakulteta tehničkih nauka u Novom Sadu.

Oženjen je i ima dva sina.

Primarna oblast dosadašnjeg profesionalnog delovanja mr Dušana Ilića je teorijska fizika čvrstog stanja, tačnije fizika nanostrukturera. Na ovom polju se prvenstveno bavio teorijskom analizom fononskih spektara (određivanje zakona disperzije i gustine fononskih stanja, redefinicija Debajevih parametara itd), kao i istraživanjem fononski indukovanih termodinamičkih osobina (toplotna kapacitivnost) u nanostruktturnim kristalima (ultratankim kristalnim filmovima, superrešetkama i kvantnim žicama). Istu problematiku obradivao je i u svom diplomskom radu („Fononski spektri u superrešetkama“, PMF Novi Sad 1999), kao i u magistarskoj tezi („Termodinamičke osobine nanostruktturnih kristala“, ETF Beograd 2007). Ova istraživanja – sprovedena u saradnji i uz veliku pomoć akademika prof. dr Jovana Šetrajčića i prof. dr Dejana Rakovića – rezultovala su stvaranjem tridesetak naučnih radova i saopštenja, od kojih su neki izlagani na vrhunskim svetskim simpozijumima (npr. *2nd WSEAS International Conference on Nanoelectronics and ElectroMagnetic Compatibility – ICONEMC*, Skiathos, Greece 2002, *MRS 2007 Spring Meeting, San Francisco, California USA* itd.) i publikovani u renomiranim svetskim i domaćim časopisima (*Physica Scripta, Materials Science Forum, International Journal of Modern Physics B, Acta Physica Polonica A, Novi Sad J.Math, Hemadska industrija*).

Od ostalih oblasti naučnog istraživanja koja su u sferi interesovanja mr Dušana Ilića neophodno je istaći radove na polju biofizike (fizika mikrotubula), pod stručnim vođstvom akademika prof. dr Miljka Satarića. Ova – takođe teorijska – istraživanja rezultovala su nastankom nekoliko naučnih radova od kojih su u ovom momentu dva publikovana u visoko rangiranim inostranim fizičkim i biofizičkim časopisima (*Chinese Physics Letters* i *European Biophysics Journal with Biophysics Letters*).

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:
Doktorska disertacija
VR
- Autor:
Dušan Ilić
AU
- Mentor:
Dr Jovan Šetrajčić,
redovni profesor, PMF, Novi Sad
MN
- Naslov rada:
Fononske specifičnosti i termodinamika
kristalnih nanostruktura
NR
- Jezik publikacije:
Srpski (latinica)
JP
- Jezik izvoda:
Srpski
JI
- Zemlja publikovanja:
Srbija
ZP
- Uže geografsko područje:
Vojvodina
UGP
- Godina:
2013.
GO
- Izdavač:
Autorski reprint
IZ
- Mesto i adresa:
Prirodno-matematički fakultet,
Trg Dositeja Obradovića 4, 21000 Novi Sad
MA
- Fizički opis rada:
(8/117/104/1/32/10/0)
FO
- Naučna oblast:
Fizika
NO
- Naučna disciplina:
Fizika čvrstog stanja
NJ
- Predmetna odrednica / ključne reči:
nanostrukture, fononi, Grinove funkcije,
spektri, termodinamika
PO
- Čuva se:
Biblioteka Instituta za fiziku,
PMF Novi Sad
- Izvod:
U disertaciji je sprovedeno teorijsko istraživanje mikroskopskih i makroskopskih (termodinamičkih) osobina tankoslojnih i niskodimenzionalih kristalnih struktura u okviru modela fonona akustičkog tipa. Upoređivanjem fononskih spektara i termodinamičkih svojstava u neograničenim i posmatranim nanostrukturama ustanovljeno je da se oni znatno razlikuju usled postojanja granica kod niskodimenzionalih sistema. Takođe je primećeno da u fononskim spektrima niskodimenzionalih struktura postoji energijski procep, što znači da je energija pobuđivanja fonona u niskodimenzionim kristalnim strukturama veća od one u balku. Ovo uzrokuje da toplotna kapacitivnost u niskotemperaturskoj oblasti ima i znatno niže vrednosti u ograničenim strukturama nego u masivnim uzorcima.
IZ
- Datum prihvatanja teme od strane Veća:
28.05.2009.
DP
- Datum odbrane:
.2013.
DO
- Članovi komisije:
 - Predsednik:
Akademik dr Miljko Satarić,
redovni profesor, FTN, Novi Sad
 - Članovi:
Dr Maja Stojanović,
vanredni profesor, PMF, Novi Sad
 - Akademik dr Jovan Šetrajčić,*
redovni profesor, PMF, Novi Sad KO

UNIVERSITY OF NOVI SAD
FACULTY OF SCIENCES
KEY WORDS DOCUMENTATION

- Accension number:
ANO
- Identification number:
INO
- Document type:
Monograph type
DT
- Type of record:
Printed text
TR
- Contents Code:
Ph Dissertation
CC
- Author:
Dušan Ilić
AU
- Mentor:
Prof. Dr. Jovan Šetrajčić
MN
- Title:
Phonon Specificities and Thermodynamics of Crystalline Nanostructures
NR
- Language of text:
Serbian
LT
- Language of abstract:
English
LA
- Country of publication:
Serbia
CP
- Locality of publication:
Vojvodina
LP
- Publication year:
2013.
PY
- Publisher:
Author's reprint
PU
- Publ.place:
Novi Sad,
Department of Physics,
Faculty of Sciences,
Trg Dositeja Obradovića 4
PP
- Physical description:
(8/117/104/1/32/10/0)
FO
- Scientific field:
Physics
SF
- Scientific discipline:
Solid State Physics
SD
- Key words:
nanostructures, phonons, Green's functions, spectra, thermodynamics
KW
- Holding data:
Library
Department of Physics, Novi Sad
- HD Note: N
- Abstract:
In this work, a theoretical study of microscopic and thermodynamic properties of thin-layered and low-dimensional crystalline structures of the model type of acoustic phonons was carried out. Comparision of the phonon spectra and thermodynamic properties of the infinite with the observed nanostructures revealed that they differ greatly because of the existence of borders in low-dimensional systems. It was also noted that in the phonon spectra of nanostructures an energy gap exists, which means that the energy of excitation of phonons in the nanostructured crystal systems is higher than those of the bulk. This indicates that the heat capacitance in the low-temperature range has a significantly lower values in bounded structures than in massive samples.
AB
- Accepted by the Scientific Board on:
28.05.2009.
ASB
- Defended:
. .2013.
DE
- Work defend board:
 - President:
Academician Dr. Miljko Satarić,
Full Professor, Faculty of Technical Sciences,
University of Novi Sad
 - Member:
Dr. Maja Stojanović,
Associated Professor, Faculty of Sciences,
University of Novi Sad
 - Menthor & Member:
Academician Dr. Jovan Šetrajčić,
Full Professor, Faculty of Sciences,
University of Novi Sad