

УНИВЕРЗИТЕТ У НОВОМ САДУ
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ
ИНСТИТУТ ЗА ФИЗИКУ

УНИВЕРЗИТЕТ У НОВОМ САДУ
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ

ИДЕНТИФИКАЦИЈА	7 IX 1998
ДРГАДЕНДА	БРОЈ
0603	9/218

- ДИПЛОМСКИ РАД -

ЕЛЕКТРОНСКИ СПЕКТРИ
НИСКОДИМЕНЗИОНИХ КРИСТАЛА

МЕНТОР

ПРОФ. ДР ЈОВАН ШЕТРАЈЧИЋ

КАНДИДАТ

ГРАДИМИР ШУШАК

Нови Сад, 1998. године

Користим ову прилику да се искрено захвалим свом ментору проф. др Јовану Шетрајчићу и мр Слађани Стојковић на свесрдној помоћи приликом израде овог рада, као и родитељима који су ме све време подржавали.

САДРЖАЈ

	Страна
1. Увод	4
2. Електрони у неограниченим кристалима	5
2.1. Електронски хамилтонијан	5
2.2. Једначине кретања и закон дисперзије	6
3. Електрони у филм-структурата	9
3.1. Моделни хамилтонијан	9
3.2. Једначине кретања	11
3.3. Закон дисперзије	14
4. Електрони у квантним жицама	16
4.1. Моделни хамилтонијан	16
4.2. Закон дисперзије	19
5. Закључак	21
6. Додатак: Гринове функције и Чебишевљеви полиноми	22
6.1. Метод Гринових функција	22
6.2. Карактеристични полиноми Чебишева	25
7. Литература	26

1. У В О Д

Од великог значаја за теорију чврстог стања је испитивање удела и утицаја електронског подсистема на физичке карактеристике материјала, јер су управо електрони носиоци свих транспортних и других физички интересантних процеса. Посебно интересантно је њихово понашање као носиоца безотпорне електричне струје, у суперпроводном стању, јер га карактерише спаривање фермиона (електрона или шупљина) које је присутно од нискотемпературске до високотемпературске суперпроводности.

Модерна наука о материјалима тежи прецизном структуирању материјала до што мањих димензија - реда величине нанометара, а феномени повезани са тако малим димензијама доводе до специфичних појава и изменењених особина материјала. Ове структуре су од ширег практичног значаја посебно на пољу електронике, оптоелектронике и високотемпературске суперпроводности. Из тог разлога, у савременој физици кондензоване материје један од главних праваца теоријских и експерименталних истраживања је испитивање особина нискодимензионих система какви су танки филмови, суперрешетке, квантне жице и квантне тачке.

У овом раду је испитан утицај гранича филм-структуре¹ и квантних жица² на енергетски спектар и могућа стања електрона (електронски закон дисперзије). Добијени резултати поређени су са одговарајућим за идеалне бесконачне кристале, да би се на основу тога уочиле најбитније разлике које се јављају услед ограничености кристалних система.

Поменута анализа вршена је методом двовременских температурских Гринових функција³ који се данас веома често користи у квантној теорији чврстог стања. Захваљујући уgraђеној статистици, тај метод се успешно примењује код израчунавања како микроскопских тако и макроскопских, равнотежних и неравнотежних својстава кристала.

Овде је најпре вршена анализа идеалних бесконачних кристалних структура, а затим исти метод применењен на филм-структуре и квантне жице.

¹Филмови представљају бесконачне структуре у свим кристалним равнима паралелним двема граничним површинама, које су нормалне на један приоритетан правац, дуж кога је посматрана систем ограничен.

²Квантне жице представљају квазиједнодимензионе системе, односно системе ограничене у два кристалографска правца.

³Постоје и други методи помоћу којих се овај проблем може третирати: метод Хајзенбергових једначина кретања, метод малих пертурбација, метод једночестичних таласних функција и сл.

2. Електрони у неограниченим кристалима

Трансляциона инваријантност идеалних кристалних структура намеће периодичан (са периодом кристалне решетке) облик многим физичким величинама које их описују (нпр. периодична расподела поља и потенцијалне енергије електрона).

Један од главних задатака теорије чврстог стања је проучавање промена дискретног енергетског спектра електрона изолованог атома - при приближавању атома и образовању кристалне структуре. У овом процесу периодично поље кристала и интеракција међу атомима доводи до цепања енергетских нивоа електрона слободних атома. Попут се кристал може третирати као гигантски молекул, то квантна стања електрона у том молекулу, због Паулијевог принципа искључења, морају бити окарактерисана различитим квантним бројевима што има за последицу формирање читавог спектра енергетских нивоа на месту једног нивоа у изолованом атому. Уместо једног енергетског нивоа, једнаког за свих N изолованих атома, у чврстом телу се појављује N блиско распоређених нивоа, који образују енергетску зону. Цепање енергетских нивоа је најизразитије за спољашње (валентне) нивое, јер се таласне функције спољашњих валентних електрона суседних атома међусобно веома преклапају, доводећи до колективизације ових стања, којима се на тај начин атоми повезују у кристал - гигантски молекул.

Ови колективизирани електрони, којима се иначе описују најкарактеристичнија својства метала, нису везани са атомима кристалне решетке и могу да се премештају по целој запремини метала. Међутим, чак и када електрон напусти атом у кристалу, он се под дејством применjenог електричног поља не креће слободно већ је подвргнут утицају кристалног поља. Овај утицај се може усредњено узети у обзир увођењем ефективне масе квазислободних носилаца наелектрисања. Такође, због специфичности кретања електрона у кристалном пољу, аномалног понашања квазислободних електрона на крајевима валентне зоне, уводи се појам квазислободних носилаца наелектрисања - шупљина.

2.1. Електронски хамилтонијан

Сада ћемо размотрити нека својства електронског подсистема идеалног бесконачног кубног кристала полазећи од хамилтонијана квазислободних електрона који у конфигурационом простору и хармонијској апроксимацији има облик:

$$H = \sum_{\vec{n}} \Delta_{\vec{n}} a_{\vec{n}}^+ a_{\vec{n}} - \sum_{\vec{n}, \vec{m}} W_{\vec{n}, \vec{m}} a_{\vec{n}}^+ a_{\vec{m}}, \quad (2.1)$$

где су $a_{\vec{n}}^+$ и $a_{\vec{n}}$ - креациони и анихилациони оператори електрона на чвору \vec{n} решетке. Величина $\Delta_{\vec{n}}$ - представља енергију електрона локализованог на чвору \vec{n} , а величине $W_{\vec{n}, \vec{m}}$ - су матрични елементи електронског трансфера са чвора \vec{n} на чвор \vec{m} . Овде је претпостављено да је број електрона по атому релативно мали (један електрон по атому) тако да се Кулонова интеракција електрона може занемарити. У том случају, лако се показује да је хамилтонијан (2.1) еквивалентан хамилтонијану

електронског гаса у апроксимацији ефективне масе:

$$H = \sum_{\vec{k}} E_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}}, \quad E_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2 m^*}. \quad (2.2)$$

Трансляциона инваријантност посматраног идеалног кристала намеће периодичност хамилтонијана (2.1) која има за последицу да су:

$$\Delta_{\vec{n}} = \Delta, \quad W_{\vec{n}, \vec{m}} = W_{\vec{m}, \vec{n}} \equiv W; \quad \forall (\vec{n}, \vec{m}) \quad (2.3)$$

На основу тога, у апроксимацији најближих суседа, електронски хамилтонијан постаје:

$$\begin{aligned} H = & \Delta \sum_{n_x n_y n_z} a_{n_x n_y n_z}^+ a_{n_x n_y n_z} - W \sum_{n_x n_y n_z} a_{n_x n_y n_z}^+ (a_{n_x+1, n_y n_z} + a_{n_x-1, n_y n_z} + \\ & + a_{n_x n_y+1, n_z} + a_{n_x n_y-1, n_z} + a_{n_x n_y n_z+1} + a_{n_x n_y n_z-1}). \end{aligned} \quad (2.4)$$

Због погодности, хамилтонијан из релације (2.4) писаћемо у облику збира:

$$H = H_1 - \sum_{\nu=2}^7 H_{\nu}, \quad (2.5)$$

где су:

$$\begin{aligned} H_1 &= \Delta \sum_{m_x m_y m_z} a_{m_x m_y m_z}^+ a_{m_x m_y m_z}; & H_2 &= W \sum_{m_x m_y m_z} a_{m_x m_y m_z}^+ a_{m_x+1, m_y m_z} \\ H_3 &= W \sum_{m_x m_y m_z} a_{m_x m_y m_z}^+ a_{m_x-1, m_y m_z}; & H_4 &= W \sum_{m_x m_y m_z} a_{m_x m_y m_z}^+ a_{m_x m_y+1, m_z} \\ H_5 &= W \sum_{m_x m_y m_z} a_{m_x m_y m_z}^+ a_{m_x m_y-1, m_z}; & H_6 &= W \sum_{m_x m_y m_z} a_{m_x m_y m_z}^+ a_{m_x m_y m_z+1} \\ H_7 &= W \sum_{m_x m_y m_z} a_{m_x m_y m_z}^+ a_{m_x m_y m_z-1}. \end{aligned}$$

2.2. Једначине кретања и закон дисперзије

Својства посматраног електронског система анализираћемо помоћу антикомутаторске Гринове функције (видети Додатак 6.1.)

$$G_{\vec{n}, \vec{m}}(t) = \Theta(t) \langle \{a_{\vec{n}}(t), a_{\vec{m}}^+(0)\} \rangle, \quad (2.6)$$

која задовољава једначину кретања:

$$i\hbar \frac{d}{dt} G_{\vec{n}, \vec{m}}(t) = i\hbar \delta_{\vec{n} \vec{m}} \delta(t) + \Theta(t) \langle \{[a_{\vec{n}}, H], a_{\vec{m}}^+\} \rangle. \quad (2.7)$$

Други део израза на десној страни једначине кретања (2.7) написаћемо као:

$$\Theta(t) \langle \{[a_{\vec{n}}, H], a_{\vec{m}}^+\} \rangle = F, \quad (2.8)$$

а комутатор:

$$\hat{C} \equiv \hat{C}_{\vec{n}} \equiv [a_{\vec{n}}, H] = \hat{C}_1 - \sum_{\nu=2}^7 \hat{C}_{\nu}, \quad (2.9)$$

на основу чега добијамо:

$$F \equiv F_{\vec{n}\vec{m}} \equiv \Theta(t) \langle \{ \hat{C}, a_{\vec{m}}^+ \} \rangle = F_1 - \sum_{\nu=2}^7 F_{\nu}. \quad (2.10)$$

За израчунавање комутатора $[a_{\vec{n}}, H]$ користићемо стандардне фермионске комутаторске релације:

$$\{a_{\vec{n}}, a_{\vec{m}}^+\} = \delta_{\vec{n}\vec{m}}, \quad \{a_{\vec{n}}, a_{\vec{m}}\} = \{a_{\vec{n}}^+, a_{\vec{m}}^+\} = 0. \quad (2.11)$$

Затим се може прећи на рачунање комутатора \hat{C}_{ν} :

$$\begin{aligned} \hat{C}_1 &= [a_{\vec{n}}, H_1] = \Delta \sum_{m_x m_y m_z} [a_{n_x n_y n_z}, a_{m_x m_y m_z}^+ a_{m_x m_y m_z}] = \\ &= \Delta \sum_{m_x m_y m_z} [a_{m_x m_y m_z}^+ (a_{n_x n_y n_z}, a_{m_x m_y m_z} - a_{m_x m_y m_z} a_{n_x n_y n_z}) + \\ &+ (a_{n_x n_y n_z} a_{m_x m_y m_z}^+ - a_{m_x m_y m_z}^+ a_{n_x n_y n_z}) a_{m_x m_y m_z}] \end{aligned} \quad (2.12)$$

На основу релације (2.11) следи: $a_{n_x n_y n_z} a_{m_x m_y m_z} = -a_{m_x m_y m_z} a_{n_x n_y n_z}$, и $a_{m_x m_y m_z}^+ a_{n_x n_y n_z} = \delta_{n_x m_x} \delta_{n_y m_y} \delta_{n_z m_z} - a_{n_x n_y n_z} a_{m_x m_y m_z}^+$, па је:

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

Познато је да $\delta_{\vec{n}\vec{m}}$ „скида“ суму по $\vec{m} \equiv (m_x, m_y, m_z)$ и свако $m_j \rightarrow n_j$, ($j = x, y, z$), те се коначно добија: $\hat{C}_1 = \Delta a_{n_x n_y n_z}$. На основу тога и (2.10) следи

$$F_1 = \Theta(t) \langle \{ \hat{C}_1, a_{\vec{m}}^+ \} \rangle = \Delta \Theta(t) \langle \{ a_{\vec{n}}, a_{\vec{m}}^+ \} \rangle = \Delta G_{\vec{n}\vec{m}}(t),$$

где израз: $\Theta(t) \langle \{ a_{\vec{n}}, a_{\vec{m}}^+ \} \rangle$ представља Гринову функцију $G_{\vec{n}\vec{m}}(t)$. Аналогним рачунањем као за \hat{C}_1 , добијају се и остале вредности комутатора \hat{C}_{ν} , помоћу којих могу да се напишу изрази за свако F_{ν} из једначине (2.10). Њиховом заменом у једначину кретања (2.7) добија се:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} G_{\vec{n},\vec{m}}(t) &= i\hbar \delta_{\vec{n}\vec{m}} \delta(t) + \Delta G_{\vec{n},\vec{m}}(t) - \\ &- W [G_{n_x+1,n_y,n_z;\vec{m}}(t) + G_{n_x-1,n_y,n_z;\vec{m}}(t) + G_{n_x,n_y+1,n_z;\vec{m}}(t) + \\ &+ G_{n_x,n_y-1,n_z;\vec{m}}(t) + G_{n_x,n_y,n_z+1;\vec{m}}(t) + G_{n_x,n_y,n_z-1;\vec{m}}(t)]. \end{aligned} \quad (2.13)$$

Пошто се ради о бесконачној транслационо инваријантној структури, могуће је извршити потпуни временско-просторни Фурије трансформ Гринових функција, Кронекерових симбола и делта функције:

$$G_{\vec{n},\vec{m}}(t) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega G_{\vec{k}}(\omega) e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})-i\omega t}, \quad (2.14)$$

$$\delta_{\vec{n}\vec{m}} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})}; \quad \delta(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega t}, \quad (2.15)$$

где је $N \equiv N_x N_y N_z$. Ако се још израз (2.14) диференцира по t :

$$\frac{d}{dt} G_{\vec{n},\vec{m}}(t) = -i\frac{\omega}{N} \sum_{\vec{k}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega G_{\vec{k}}(\omega) e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})-i\omega t}, \quad (2.16)$$

а затим све то замени у једначину (2.13) добија се:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi N} \sum_{\vec{k}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})-i\omega t} & \left\{ -i\hbar + 2\pi [\hbar\omega - \Delta + W (e^{+iak_x} + e^{-iak_x}) + \right. \\ & \left. + W (e^{+iak_y} + e^{-iak_y} + e^{+iak_z} + e^{-iak_z})] G_{\vec{k}}(\omega) \right\} = 0, \end{aligned} \quad (2.17)$$

односно:

$$[\hbar\omega - \Delta + 2W (\cos ak_x + \cos ak_y + \cos ak_z)] G_{\vec{k}}(\omega) = \frac{i\hbar}{2\pi},$$

одакле даље следи:

$$G_{\vec{k}}(\omega) = \frac{i}{2\pi} \frac{1}{\omega - \omega_{\vec{k}}} \equiv \frac{i\hbar}{2\pi} \frac{1}{E - E_{\vec{k}}}, \quad (2.18)$$

где

$$E_{\vec{k}} = \hbar \omega_{\vec{k}} = \Delta - 2W (\cos ak_x + \cos ak_y + \cos ak_z) \quad (2.19)$$

представља закон дисперзије везаних електрона. У случају слабо везаних електрона (дегенерисан електронски гас), $\Delta = 6W$ па је:

$$\mathcal{E}_{\vec{k}} \equiv \frac{E_{\vec{k}}}{4W} = \sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y}{2} + \sin^2 \frac{ak_z}{2}. \quad (2.20)$$

3. Електрони у филм-структурима

У претходној глави истражени су спектри и стања наелектрисања неограниченх кристалних структура. Примењујући исти приступ овде ћемо одредити исте карактеристике наелектрисања, али у кристалним филм-структурима.

3.1. Моделни хамилтонијан

Хамилтонијан везаних електрона у танким кристалним филмовима можемо формирати полазећи од „балковског“ хамилтонијана (2.1), односно (2.4), који у апроксимацији најближих суседа има развијени облик:

$$\begin{aligned} H = & \sum_{n_x n_y n_z} \Delta_{n_x n_y n_z} a_{n_x n_y n_z}^+ a_{n_x n_y n_z} - \sum_{n_x n_y n_z} a_{n_x n_y n_z}^+ \times \\ & \times \left(W_{n_x n_y n_z; n_x+1, n_y, n_z} a_{n_x+1, n_y, n_z} + W_{n_x n_y n_z; n_x-1, n_y, n_z} a_{n_x-1, n_y, n_z} + \right. \\ & + W_{n_x n_y n_z; n_x n_y+1, n_z} a_{n_x n_y+1, n_z} + W_{n_x n_y n_z; n_x n_y-1, n_z} a_{n_x n_y-1, n_z} + \\ & \left. + W_{n_x n_y n_z; n_x n_y n_z+1} a_{n_x n_y n_z+1} + W_{n_x n_y n_z; n_x n_y n_z-1} a_{n_x n_y n_z-1} \right). \end{aligned} \quad (3.1)$$

Пошто су граничне површине филма узете нормално на z - правац, индекс слоја n_z у (3.1) - узима вредности $n_z = 0, 1, 2, \dots, N_z$, где је $N_z \in [2, 20]$ код ултратанких филмова. Индекси n_x и n_y , који одређују положај атома у сваком слоју могу имати произвољне целобројне вредности (практично, од $-\infty$, до $+\infty$).

За разлику од идеалних бесконачних структура, реални кристали не поседују особину транслационе инваријантности. Постојање извесних граничних услова, један је од узрока нарушења симетрије. Системи који имају две паралелне граничне површине називају се филмовима. Посматра се идеални танки филм кубне кристалне структуре, начињен на субстрату неким техничко-технолошким поступком (напаравањем, спатеровањем и сл.). Појам идеални филм користи се у смислу ненарушења кристалне структуре (без присуства дефеката, примеса и сл.), а не у смислу просторне неограничености. Димензије филма су такве да је он у XY равнима бесконачан, а у z правцима има коначну дебљину (L). Значи да овај филм поседује две бесконачне граничне површине паралелне XY равнима и то за: $z = 0$ и $z = L$ (слика 3.1).

Разматраћемо аналитички решив случај који одговара филм-структури која је „исечена“ из бесконачне. Због постојања гранича филма узећемо да је енергија електрона облика:

$$\begin{aligned} \Delta_{n_x n_y n_z} &= 0 \quad \text{за } n_z < 0 \text{ и } n_z > N_z, \\ \Delta_{n_x n_y n_z} &= \Delta \quad \text{за } 0 \leq n_z \leq N_z, \end{aligned} \quad (3.2)$$

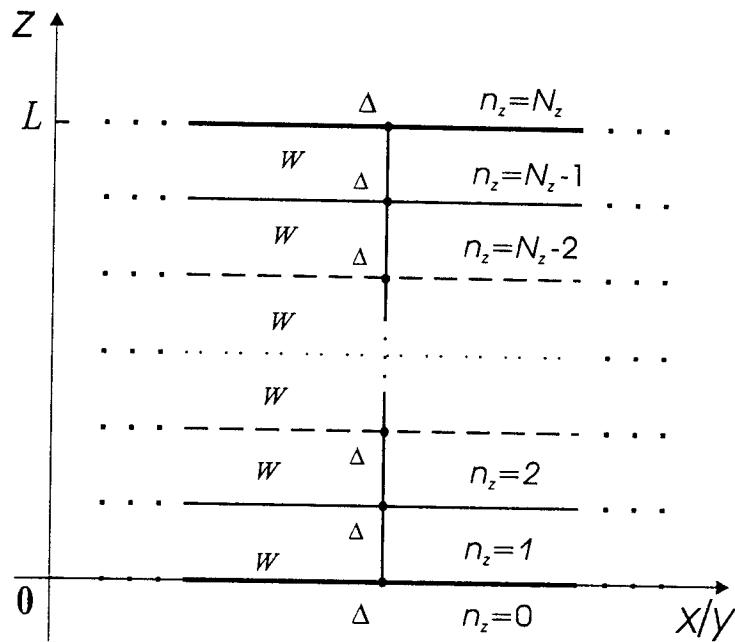
а матрични елементи електронског прескока са слоја на слој су:

$$\begin{aligned} W_{n_x n_y 0; n_x n_y n_z} &= 0 \quad \text{за } n_z < 0, \\ W_{n_x n_y N_z; n_x n_y n_z} &= 0 \quad \text{за } n_z > N_z, \\ W_{n_x n_y n_z; n_x n_y, n_z+1} &= W \quad \text{за } 0 \leq n_z \leq N_z - 1, \\ W_{n_x n_y n_z; n_x n_y, n_z-1} &= W \quad \text{за } 1 \leq n_z \leq N_z, \end{aligned} \quad (3.3)$$

при чему је за сваки слој,

$$W_{n_x n_y n_z; n_x \pm 1, n_y n_z} = W_{n_x n_y n_z; n_x n_y \pm 1, n_z} \equiv W, \quad (3.4)$$

где је W - константа електронског трансфера идеалног кристала.



Слика 3.1: Пресек модела кристалног филма у $X(Y)Z$ равни

Електронски хамилтонијан танких кристалних филмова можемо сада написати у облику:

$$H = H_z + H_p,$$

$$\begin{aligned} H_z &= \sum_{m_x m_y} \sum_{m_z=1}^{N_z-1} a_{m_x m_y m_z}^+ \left[\Delta a_{m_x m_y m_z} - W (a_{m_x+1, m_y m_z} + a_{m_x-1, m_y m_z} + \right. \\ &\quad \left. + a_{m_x m_y+1, m_z} + a_{m_x m_y-1, m_z} + a_{m_x m_y m_z+1} + a_{m_x m_y m_z-1}) \right]; \\ H_p &= \sum_{m_x m_y} \left\{ a_{m_x m_y 0}^+ [\Delta a_{m_x m_y 0} - W a_{m_x m_y 1}] + \right. \\ &\quad + a_{m_x m_y N_z}^+ [\Delta a_{m_x m_y N_z} - W a_{m_x m_y N_z-1}] - \\ &\quad - W a_{m_x m_y 0}^+ (a_{m_x+1, m_y 0} + a_{m_x-1, m_y 0} + a_{m_x m_y+1, 0} + a_{m_x m_y-1, 0}) - \\ &\quad \left. - W a_{m_x m_y N_z}^+ (a_{m_x+1, m_y N_z} + a_{m_x-1, m_y N_z} + a_{m_x m_y+1, N_z} + a_{m_x m_y-1, N_z}) \right\}. \end{aligned} \quad (3.5)$$

3.2. Једначине кретања

Помоћу тако претходно дефинисаног хамилтонијана, најпре ћемо израчунати једночестичне антитомутаторске Гринове функције:

$$G_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z}(t) = \Theta(t) \langle \{ a_{n_x n_y n_z}(t), a_{m_x m_y m_z}^+(0) \} \rangle, \quad (3.6)$$

које одређују равнотежна својства електрона у танким кристалним филмовима (видети Додатак 6.1.).

Електронске Гринове функције се могу израчунати микротеоријском процедуром на сличан начин као што је урађено у претходној глави. Потребно је пре свега формирати једначине кретања диференцирањем претходног израза по времену:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} G_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z}(t) &= i\hbar \delta(t) \delta_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z} + \\ &+ \Theta(t) \langle \{ [a_{n_x n_y n_z}(t), H], a_{m_x m_y m_z}^+(0) \} \rangle \end{aligned} \quad (3.7)$$

и израчунати одговарајуће комутаторе (истим поступком као и за идеалне структуре), након чега добијамо:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} G_{\vec{n}, \vec{m}}(t) &= i\hbar \delta_{\vec{n}, \vec{m}} \delta(t) + \Delta G_{\vec{n}, \vec{m}}(t) - \\ &- W [G_{n_x+1, n_y n_z; \vec{m}}(t) + G_{n_x-1, n_y n_z; \vec{m}}(t) + G_{n_x n_y+1, n_z; \vec{m}}(t) + \\ &+ G_{n_x n_y-1, n_z; \vec{m}}(t) + G_{n_x n_y n_z+1; \vec{m}}(t) + G_{n_x n_y n_z-1; \vec{m}}(t)] . \end{aligned} \quad (3.8)$$

Увођењем временске и делимичне⁴ просторне Фурије-трансформације:

$$G_{n_x n_y n_z; \vec{m}}(t) = \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{i[k_x a_x(n_x - m_x) + k_y a_y(n_y - m_y)]} e^{-i\omega t} G_{n_z; m_z}(k_x, k_y; \omega) \quad (3.9)$$

$$\delta_{n_x m_x} \delta_{n_y m_y} \delta_{n_z m_z} = \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} e^{i[k_x a_x(n_x - m_x) + k_y a_y(n_y - m_y)]} \delta_{n_z m_z} ,$$

(где је: $n_z = 0, 1, 2, \dots, N_z$ и $a_x = a_y = a$), те заменом горњих трансформација у једначину кретања (3.8) добија се:

$$\begin{aligned} &\frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega t} e^{ia[k_x(n_x - m_x) + k_y(n_y - m_y)]} \{ [\hbar\omega - \Delta + \\ &+ W (e^{iak_x} + e^{-iak_x} + e^{iak_y} + e^{-iak_y})] G_{n_z; m_z}(k_x k_y; \omega) + \\ &+ W [G_{n_z+1; m_z}(k_x k_y; \omega) + G_{n_z-1; m_z}(k_x k_y; \omega)] - \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{n_z m_z} \} = 0 , \end{aligned}$$

⁴Просторна Фурије-трансформација мора бити делимична $(n_x n_y n_z) \rightarrow (k_x, k_y, n_z)$ јер је посматрани систем ограничен дуж z -правца.

односно:

$$\begin{aligned} [\hbar\omega - \Delta + 2W(\cos ak_x + \cos ak_y)] G_{n_z; m_z}(k_x k_y; \omega) + \\ + W[G_{n_z+1; m_z}(k_x k_y; \omega) + G_{n_z-1; m_z}(k_x k_y; \omega)] = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{n_z m_z}, \end{aligned} \quad (3.10)$$

која важи за $1 \leq n_z \leq N_z - 1$. Уколико је $n_z = 0$, једначина кретања има облик:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} G_{n_x n_y 0; \vec{m}}(t) = i\hbar \delta_{n_x m_x} \delta_{n_y m_y} \delta_{0, m_z} \delta(t) + \\ + \Delta G_{n_x n_y 0; \vec{m}}(t) - W G_{n_x n_y 0; \vec{m}} - \\ - W [G_{n_x+1, n_y 0; \vec{m}}(t) + G_{n_x-1, n_y 0; \vec{m}}(t) + G_{n_x n_y +1, 0; \vec{m}}(t) + G_{n_x n_y -1, 0; \vec{m}}(t)]. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Увођењем Фурије-трансформација, уз услов $n_z = 0$, добија се

$$\begin{aligned} \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y = -\infty}^{+\infty} \int d\omega e^{-i\omega t} e^{ia[k_x(n_x - m_x) + k_y(n_y - m_y)]} \{2\pi [\hbar\omega - \Delta + \\ + W(e^{ik_x} + e^{-ik_x} + e^{ik_y} + e^{-ik_y})] G_{0; m_z}(k_x k_y; \omega) + \\ + W G_{1; m_z}(k_x k_y; \omega) - \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{0, m_z}\} = 0, \end{aligned}$$

односно:

$$\begin{aligned} [\hbar\omega - \Delta + 2W(\cos ak_x + \cos ak_y)] G_{0; m_z}(k_x k_y; \omega) + \\ + W G_{1; m_z}(k_x k_y; \omega) = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{0, m_z}. \end{aligned} \quad (3.12)$$

У случају $n_z = 1$, једначина кретања ће бити:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} G_{n_x n_y 1; \vec{m}}(t) = i\hbar \delta_{n_x m_x} \delta_{n_y m_y} \delta_{1, m_z} \delta(t) + \Delta G_{n_x n_y 1; \vec{m}}(t) - \\ - W G_{n_x n_y 0; \vec{m}} - W [G_{n_x+1, n_y 1; \vec{m}}(t) + G_{n_x-1, n_y 1; \vec{m}}(t) + \\ + G_{n_x n_y +1, 1; \vec{m}}(t) + G_{n_x n_y -1, 1; \vec{m}}(t) + G_{n_x n_y 2; \vec{m}}(t)]. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Аналогним поступком као у претходном случају, преко Фурије-трансформација (3.9), добија се:

$$\begin{aligned} [\hbar\omega - \Delta + 2W(\cos ak_x + \cos ak_y)] G_{1; m_z}(k_x k_y; \omega) + \\ + W [G_{2; m_z}(k_x k_y; \omega) + G_{0; m_z}(k_x k_y; \omega)] = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{1, m_z}, \end{aligned} \quad (3.14)$$

док се за $n_z = N_z - 1$, истим прорачуном добија:

$$\begin{aligned} [\hbar\omega - \Delta + 2W(\cos ak_x + \cos ak_y)] G_{N_z-1; m_z}(k_x k_y; \omega) + \\ + W [G_{N_z-2; m_z}(k_x k_y; \omega) + G_{N_z; m_z}(k_x k_y; \omega)] = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{N_z-1, m_z}. \end{aligned} \quad (3.15)$$

За случај $n_z = N_z$, једначина кретања се на исти начин своди на:

$$\begin{aligned} [\hbar\omega - \Delta + 2W(\cos ak_x + \cos ak_y)] G_{N_z; m_z}(k_x k_y; \omega) + \\ + W G_{N_z-1; m_z}(k_x k_y; \omega) = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{N_z m_z}. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Сада можемо формирати систем од једначина (3.10), (3.12) и (3.14-16). Сваку од ових једначина делимо са W , при чему уводимо ознаке:

$$\begin{aligned} \varrho = \hbar \frac{\omega}{W} - \frac{\Delta}{W} + 2(\cos ak_x + \cos ak_y); \\ G_{n_z; m_z}(k_x, k_y; \omega) \equiv G_{n_z}; \quad \mathcal{K}_{n_z} = \frac{i\hbar}{2\pi W} \delta_{n_z, m_z} \end{aligned} \quad (3.17)$$

(индекс m_z је „паразитски“ - видети Додатак 6.1., па је овде избачен). Поменути систем једначина има онда облик:

$$\begin{aligned} \varrho G_0 + G_1 &= \mathcal{K}_0 \\ G_0 + \varrho G_1 + G_2 &= \mathcal{K}_1 \\ G_1 + \varrho G_2 + G_3 &= \mathcal{K}_2 \\ &\vdots && \vdots \\ G_{n_z-1} + \varrho G_{n_z} + G_{n_z+1} &= \mathcal{K}_{n_z} \\ &\vdots && \vdots \\ G_{N_z-3} + \varrho G_{N_z-2} + G_{N_z-1} &= \mathcal{K}_{N_z-2} \\ G_{N_z-2} + \varrho G_{N_z-1} + G_{N_z} &= \mathcal{K}_{N_z-1} \\ G_{N_z-1} + \varrho G_{N_z} &= \mathcal{K}_{N_z} \end{aligned} \quad (3.18)$$

Овај систем диференцијних алгебарских једначина садржи $N_z + 1$ непознатих Гринових функција: $G_0, G_1, G_2, \dots, G_{N_z}$. На основу општих алгебарских ставова, јасно је да се непознате могу изразити као:

$$G_{n_z} = \frac{\mathcal{D}_{n_z}}{\mathcal{D}_{N_z+1}},$$

где \mathcal{D}_{n_z} представља одговарајућу „заменску“ детерминанту, а \mathcal{D}_{N_z+1} - детерминанту система.

У циљу основног задатка овог истраживања, а то је одређивање електронских енергија, потребни су нам полови Гринових функција (видети Додатак 6.1.), који се добијају када исте теже бесконачности, што значи да мора бити:

$$\mathcal{D}_{N_z+1} \equiv 0, \quad (3.19)$$

$$\mathcal{D}_{N_z+1}(\varrho) = \begin{vmatrix} \varrho & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & \varrho & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \varrho & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & \varrho & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & \varrho & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & \varrho \end{vmatrix}_{N_z+1} \quad (3.20)$$

$\mathcal{D}_{N_z+1}(\varrho)$ представља детерминанту система и може да се напише у развијеном облику:

$$\mathcal{D}_{N_z+1}(\varrho) = \varrho^2 \mathcal{P}_{N_z-1} - 2\varrho \mathcal{P}_{N_z-2} + \mathcal{P}_{N_z-3}, \quad (3.21)$$

где је \mathcal{P}_{N_z} карактеристични Чебишевљев полином друге врсте (видети Додатак 6.2.).

3.3. Закон дисперзије

Упоређујући горњу детерминанту са Чебишевљевим полиномима види се да је:

$$\mathcal{D}_{N_z+1}(\varrho) = \mathcal{P}_{N_z+1}(\zeta) = \frac{\sin((N_z+2)\zeta)}{\sin \zeta}; \quad \varrho = 2 \cos \zeta. \quad (3.22)$$

Из услова (3.19), тј. за $\mathcal{P}_{N_z+1} \equiv 0$, добија се:

$$\zeta_\mu = \frac{\pi \mu}{N_z + 2}; \quad \mu = 1, 2, 3, \dots, N_z + 1. \quad (3.23)$$

На основу овога и једначине (3.17) налазимо:

$$\hbar \omega_\mu = \Delta - 2W (\cos ak_x + \cos ak_y - \cos \zeta_\mu), \quad (3.24)$$

где је $\cos \zeta_\mu = -\cos ak_z(\nu)$, $\nu = N_z + 2 - \mu$, а

$$k_z(\nu) = \frac{\pi}{a} \frac{\nu}{N_z + 2}; \quad \nu = 1, 2, 3, \dots, N_z + 1. \quad (3.25)$$

Заменом ових релација у (3.21) и узимајући у обзир да је $E_{\vec{k}}(\nu) = \hbar\omega_\nu$ и $\Delta = 6W$, следи:

$$\mathcal{E}_{\vec{k}}(\nu) \equiv \mathcal{F}_{k_x k_y} + \mathcal{G}_{k_z}(\nu), \quad (3.26)$$

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

Израз (3.26) представља закон дисперзије слабо везаних електрона у филму и има исту форму као израз (2.20) добијен за идеалне неограничене структуре, с разликом што је тамо k_z практично континуално променљиво (у интервалу $[0, \pi/a]$)⁵ као што су k_x и k_y , а овде је дискретно - дато изразом (3.25).

⁵Посматрамо само „десну” половину спектра ($k_j \geq 0$, $j = x, y, z$) знаяјући да је он огледалски симетричан.

Поред тога, уочава се да је:

$$k_x^{min} = k_y^{min} = 0 ; \quad k_z^{min} = \frac{\pi}{a} \frac{1}{N_z + 2} > 0 , \quad (3.27)$$

пошто је у питању танак филм, односно: $N_z \ll (N_x, N_y)$ и:

$$k_x^{max} = k_y^{max} = \frac{\pi}{a} ; \quad k_z^{max} = \frac{\pi}{a} \frac{N_z + 1}{N_z + 2} < \frac{\pi}{a} . \quad (3.28)$$

Између минималне и максималне вредности за k_z , па према томе и за $\mathcal{E}_{\vec{k}}$, постоји још $N_z - 1$ -а дискретна вредност.

У складу са горе поменутим, долазимо до закључка да електронски спектар у танком филму поседује два енергетска гепа, доњи g и горњи h :

$$g \equiv \mathcal{E}_f^{min} - \mathcal{E}_b^{min} = \left(\frac{\pi}{N_z + 2} \right)^2 \equiv \mathcal{E}_b^{max} - \mathcal{E}_f^{max} = h \quad (3.29)$$

(индекс f означава филм, а b бесконачну структуру). Види се да величине гепова нагло опадају са дебљином филма (квадратна зависност). То значи да је њихова практична егзистенција везана само за ултратанке (нано) структуре.

4. Електрони у квантним жицама

Посматра се идеална квантна жица просте кубне кристалне структуре. Димензије жице су такве да је она у x правцу бесконачна, а у y и z правцима има коначну дебљину (L_1 и L_2). Значи да овај систем поседује две граничне површине паралелне XZ равнинама и то за: $y = 0$ и $y = L_1$ и две граничне површине паралелне XY равнинама за: $z = 0$ и $z = L_2$.

Пошто су граничне површине квантне жице узете нормално на y и z - правце, индекси слојева n_y и n_z у (3.1) - узимају вредности $n_y = 0, 1, 2, \dots, N_y$; $n_z = 0, 1, 2, \dots, N_z$ где је $N_{y/z} \in [2, 20]$. Индекс n_x , који одређује положај атома у сваком слоју може имати произвољне целобројне вредности (практично, од $-\infty$, до $+\infty$).

Разматраћемо аналитички решив случај који одговара структури која је „исечена” из бесконачне. Због постојања граница жице узећемо да је енергија електрона облика:

$$\begin{aligned}\Delta_{n_x n_y n_z} &= 0 && \text{за } n_{y/z} < 0 \text{ и } n_{y/z} > N_{y/z}, \\ \Delta_{n_x n_y n_z} &= \Delta && \text{за } 0 \leq n_{y/z} \leq N_{y/z},\end{aligned}\quad (4.1)$$

а матрични елементи електронског прескока са слоја на слој су:

$$\begin{aligned}W_{n_x 0 n_z; n_x n_y n_z} &= 0 && \text{за } n_y < 0, \\ W_{n_x N_y n_z; n_x n_y n_z} &= 0 && \text{за } n_y > N_y, \\ W_{n_x n_y n_z; n_x n_y +1, n_z} &= W && \text{за } 0 \leq n_y \leq N_y - 1, \\ W_{n_x n_y n_z; n_x n_y -1, n_z} &= W && \text{за } 1 \leq n_y \leq N_y,\end{aligned}\quad (4.2)$$

и

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

при чему је за сваки слој,

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

где је W - константа електронског трансфера идеалног кристала.

4.1. Моделни хамилтонијан

Електронски хамилтонијан квантних жица слично као и код филма можемо написати у облику збира два хамилтонијана, тако да је запремински хамилтонијан облика:

$$\begin{aligned}H_z &= \sum_{m_x}^{N_y-1} \sum_{m_y=1}^{N_z-1} \sum_{m_z=1}^{N_z-1} a_{m_x m_y m_z}^+ \left[\Delta a_{m_x m_y m_z} - W \left(a_{m_x+1, m_y m_z} + a_{m_x-1, m_y m_z} + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + a_{m_x m_y+1, m_z} + a_{m_x m_y-1, m_z} + a_{m_x m_y m_z+1} + a_{m_x m_y m_z-1} \right) \right],\end{aligned}\quad (4.5)$$

а површински:

$$\begin{aligned}
 H_p = & \sum_{m_x} \sum_{m_y=1}^{N_y-1} \left\{ a_{m_x m_y 0}^+ [\Delta a_{m_x m_y 0} - W a_{m_x m_y 1}] + a_{m_x m_y N_z}^+ [\Delta a_{m_x m_y N_z} - \right. \\
 & - W a_{m_x m_y N_z-1}] - W a_{m_x m_y 0}^+ (a_{m_x+1, m_y 0} + a_{m_x-1, m_y 0} + a_{m_x m_y+1, 0} + a_{m_x m_y-1, 0}) - \\
 & - W a_{m_x m_y N_z}^+ (a_{m_x+1, m_y N_z} + a_{m_x-1, m_y N_z} + a_{m_x m_y+1, N_z} + a_{m_x m_y-1, N_z}) \Big\} \\
 & + \sum_{m_x} \sum_{m_z=1}^{N_z-1} \left\{ a_{m_x 0 m_z}^+ [\Delta a_{m_x 0 m_z} - W a_{m_x 1 m_z}] + a_{m_x N_y m_z}^+ [\Delta a_{m_x N_y m_z} - \right. \\
 & - W a_{m_x N_y-1, m_z}] - W a_{m_x 0 m_z}^+ (a_{m_x+1, 0 m_z} + a_{m_x-1, 0 m_z} + a_{m_x 0, m_z+1} + a_{m_x 0, m_z-1}) - \\
 & - W a_{m_x N_y m_z}^+ (a_{m_x+1, N_y m_z} + a_{m_x-1, N_y m_z} + a_{m_x N_y m_z+1} + a_{m_x N_y m_z-1}) \Big\} \\
 & + \Delta \sum_{m_x} [a_{m_x 0 0}^+ a_{m_x 0 0} + a_{m_x N_y 0}^+ a_{m_x N_y 0} + a_{m_x 0 N_z}^+ a_{m_x 0 N_z} + a_{m_x N_y N_z}^+ a_{m_x N_y N_z}] . \tag{4.6}
 \end{aligned}$$

За добијање закона дисперзије квантних жица користимо се аналогном микротеријском процедуром израчунавања као у претходна два поглавља. У овом случају у једначину кретања (3.8) уводимо следеће временске и делимичне просторне Фурије трансформације:

$$G_{n_x n_y n_z; \vec{m}}(t) = \frac{1}{N_x} \sum_{k_x} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{ik_x a_x (n_x - m_x)} e^{-i\omega t} G_{n_y n_z; m_y m_z}(k_x; \omega) \tag{4.7}$$

$$\delta_{n_x m_x} \delta_{n_y m_y} \delta_{n_z m_z} = \frac{1}{N_x} \sum_{k_x} e^{ik_x a_x (n_x - m_x)} \delta_{n_y m_y} \delta_{n_z m_z},$$

(где је: $n_{y/z} = 0, 1, 2, \dots, N_{y/z}$ и $a_x = a$). Заменом горњих трансформација у једначину кретања (3.8) добија се:

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{N_x} \sum_{k_x} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega t} e^{ia k_x (n_x - m_x)} \left\{ [\hbar\omega - \Delta + W (e^{ia k_x} + e^{-ia k_x})] \times \right. \\
 & \times G_{n_y n_z; m_y m_z}(k_x; \omega) + W [G_{n_y+1, n_z; m_y m_z}(k_x; \omega) + G_{n_y-1, n_z; m_y m_z}(k_x; \omega) + \tag{4.8} \\
 & \left. + G_{n_y, n_z+1; m_y m_z}(k_x; \omega) + G_{n_y, n_z-1; m_y m_z}(k_x; \omega)] - \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{n_y m_y} \delta_{n_z m_z} \right\} = 0,
 \end{aligned}$$

односно:

$$\begin{aligned}
 & [\hbar\omega - \Delta + 2W \cos ak_x] G_{n_y n_z; m_y m_z}(k_x; \omega) + \\
 & + W [G_{n_y+1, n_z; m_y m_z}(k_x; \omega) + G_{n_y-1, n_z; m_y m_z}(k_x; \omega) + \tag{4.9} \\
 & + G_{n_y, n_z+1; m_y m_z}(k_x; \omega) + G_{n_y, n_z-1; m_y m_z}(k_x; \omega)] = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{n_y m_y} \delta_{n_z m_z}.
 \end{aligned}$$

Из ове једначине, а уз граничне услове, добијамо системе диференцијних једначина:

1. $n_z = 0$

(a) $n_y = 0$

$$[\hbar\omega - \Delta + 2W \cos ak_x] G_{0,0} + W [G_{1,0} + G_{0,1}] = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{0,m_y} \delta_{0,m_z} \quad (4.10)$$

(б) $1 \leq n_y \leq N_y - 1$

$$[\hbar\omega - \Delta + 2W \cos ak_x] G_{n_y,0} + W [G_{n_y+1,0} + G_{n_y-1,0} + G_{n_y,1}] = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{n_y,m_y} \delta_{0,m_z} \quad (4.11)$$

(в) $n_y = N_y$

$$[\hbar\omega - \Delta + 2W \cos ak_x] G_{N_y,0} + W [G_{N_y-1,0} + G_{N_y,1}] = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{N_y,m_y} \delta_{0,m_z} \quad (4.12)$$

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

(а) $n_y = 0$

$$[\hbar\omega - \Delta + 2W \cos ak_x] G_{0,n_z} + W [G_{1,n_z} + G_{0,n_z+1} + G_{0,n_z-1}] = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{0,m_y} \delta_{n_z,m_z} \quad (4.13)$$

(б) $1 \leq n_y \leq N_y - 1$

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - \Delta + 2W \cos ak_x] G_{n_y,n_z} + W [G_{n_y+1,n_z} + G_{n_y-1,n_z} + \\ & + G_{n_y,n_z+1} + G_{n_y,n_z-1}] = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{n_y,m_y} \delta_{n_z,m_z} \end{aligned} \quad (4.14)$$

(в) $n_y = N_y$

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - \Delta + 2W \cos ak_x] G_{N_y,n_z} + W [G_{N_y-1,n_z} + \\ & + G_{N_y,n_z+1} + G_{N_y,n_z-1}] = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{N_y,m_y} \delta_{n_z,m_z} \end{aligned} \quad (4.15)$$

3. $n_z = N_z$

(а) $n_y = 0$

$$[\hbar\omega - \Delta + 2W \cos ak_x] G_{0,N_z} + W [G_{1,N_z} + G_{0,N_z-1}] = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{0,m_y} \delta_{N_z,m_z} \quad (4.16)$$

(б) $1 \leq n_y \leq N_y - 1$

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - \Delta + 2W \cos ak_x] G_{n_y,N_z} + W [G_{n_y+1,N_z} + G_{n_y-1,N_z} + \\ & + G_{n_y,N_z-1}] = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{n_y,m_y} \delta_{N_z,m_z} \end{aligned} \quad (4.17)$$

(в) $n_y = N_y$

$$[\hbar\omega - \Delta + 2W \cos ak_x] G_{N_y,N_z} + W [G_{N_y-1,N_z} + G_{N_y,N_z-1}] = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{N_y,m_y} \delta_{n_z,m_z} \quad (4.18)$$

Сада можемо формирати систем од једначина (4.10-18). Сваку од ових једначина делимо са W , при чemu уводимо ознаке:

$$\varrho = \frac{\hbar}{W} \omega - \frac{\Delta}{W} + 2\cos ak_x ; \quad (4.19)$$

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

(индекси m_y и m_z су „паразитски” па су овде избачени). Поменути систем једначина онда има општи облик:

$$\begin{aligned} & G_{n_y-1, n_z} + \\ & G_{n_y, n_z-1} + \varrho G_{n_y, n_z} + G_{n_y, n_z+1} + \\ & + G_{n_y+1, n_z} = \mathcal{K}_{n_y n_z} \end{aligned} \quad (4.20)$$

Ово је заправо $2D$ систем диференцијалних алгебарских једначина (посебно по n_y и посебно по n_z) и садржи $(N_y + 1) \times (N_z + 1)$ непознатих Гринових функција.

4.2. Закон дисперзије

На основу општих алгебарских ставова, јасно је да се непознате Гринове функције из (4.20) могу изразити као:

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

где \mathcal{D}_{n_y, n_z} представља одговарајућу „заменску” детерминанту, а $\mathcal{D}_{N_y+1, N_z+1}$ - $2D$ детерминанту система:

$$\mathcal{D}_{N_y+1, N_z+1} = \left| \begin{array}{ccccccc} R & J & O & \cdots & O & O & O \\ J & R & J & \cdots & O & O & O \\ O & J & R & \cdots & O & O & O \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ O & O & O & \cdots & R & J & O \\ O & O & O & \cdots & J & R & J \\ O & O & O & \cdots & O & J & R \end{array} \right|_{N_y+1} \quad (4.21)$$

где је:

$$R \equiv R_{N_z+1} = \left| \begin{array}{ccccccc} \varrho & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & \varrho & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \varrho & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \varrho & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & \varrho & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & \varrho \end{array} \right|_{N_z+1} \quad (4.22)$$

J је јединична, а O нулта матрица (обе реда $N_z + 1$).

У циљу основног задатка овог истраживања, а то је одређивање електронских енергија, потребни су нам полови Гринових функција, који се добијају када исте теже бесконачности, што значи да мора бити:

$$\mathcal{D}_{N_y+1, N_z+1} \equiv 0 . \quad (4.23)$$

Како $\mathcal{D}_{N_y+1, N_z+1}(\varrho)$ представља познату $2D$ детерминанту система, она може да се изрази преко карактеристичних Чебишевљевих полинома друге врсте.

Услов (4.21) се „распада” на два услова:

$$D_{N_y+1} \equiv 0 ; \quad R_{N_z+1} \equiv 0 , \quad (4.24)$$

при чему D_{N_y+1} представља „обичну” детерминанту $\mathcal{D}_{N_y+1, N_z+1}$ у којој је R замењен са ϱ и J са 1.

Решавањем услова $D_{N_y+1} = 0$ добијају се вредности:

$$\varrho_\nu = -2 \cos ak_y(\nu) ; \quad k_y(\nu) = \frac{\pi}{a} \frac{\nu}{N_y + 2} ; \quad \nu = 1, 2, \dots, N_y + 1 , \quad (4.25)$$

а решавањем услова $R_{N_z+1} = 0$ добијају се вредности:

$$\varrho_\mu = -2 \cos ak_z(\mu) ; \quad k_z(\mu) = \frac{\pi}{a} \frac{\mu}{N_z + 2} ; \quad \mu = 1, 2, \dots, N_z + 1 . \quad (4.26)$$

Познато је да је:

$$\varrho = \varrho_{\mu, \nu} = \varrho_\mu + \varrho_\nu , \quad (4.27)$$

где је:

$$\varrho = 4\mathcal{E}_{\vec{k}} - 4 \left(1 + \sin^2 \frac{ak_x}{2} \right) . \quad (4.28)$$

На основу израза (4.25-28) добија се закон дисперзије електрона у квантним жицама:

$$\mathcal{E}_{\vec{k}} = \sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y(\nu)}{2} + \sin^2 \frac{ak_z(\mu)}{2} . \quad (4.29)$$

Види се да квазимпулс електрона у квантним жицама узима дискретне вредности у y и z -правцима, док је у x -правцу практично континуалан.

Такође се уочава да је минимална енергија електрона различита од нуле (када је $k_x^{min} = 0$) и дата је изразом:

$$\mathcal{E}_{\vec{k}}^{min} = \sin^2 \frac{ak_y^{min}(\nu)}{2} + \sin^2 \frac{ak_z^{min}(\mu)}{2} , \quad (4.30)$$

где су:

$$k_y^{min}(\nu) = k_y(1) = \frac{\pi}{a} \frac{1}{N_y + 2} ; \quad k_z^{min}(\mu) = k_z(1) = \frac{\pi}{a} \frac{1}{N_z + 2} . \quad (4.31)$$

Поређењем израза (3.29) и (4.30) за енергетске гепове у филм-структурима и квантним жицама види се да оба зависе од димензија узорака, али да то код квантних жица израженије јер поседују два ограничења. Са повећањем димензија узорака гепови испчезавају.

5. Закључак

У раду су истражени и анализирани енергетски спектри (могућа енергетска стања) елементарних носилаца наелектрисања у кристалним идеалним бесконачним, тј. неограниченим и у ограниченим структурама (филмовима и жицама), са примитивном кубном решетком. На основу овога се дошло до следећих важнијих резултата.

1. Ове анализе су показале битне разлике у закону дисперзије наелектрисања у поменутим системима, као искључиве последице постојања граница одговарајуће структуре, у којима енергетски спектри поседују енергетске гепове. Величине гепова зависе од димензија узорака (дебљине филма, односно, дебљине и ширине жице) и веома брзо - практично параболички, опадају са њиховим повећањем.
2. Постојање граничних услова има за последицу промену ширине енергетске зоне електрона. У односу на зону дозвољених енергија идеалних структура са практично континуалним распоредом, зона електронских дозвољених енергија у филму је изразито дискретна. Повећањем броја слојева филма повећава се број дискретних стања унутар зоне дозвољених енергија, као и сама ширина ове зоне. Код квантних жица ова дискретност (као и зонско сужење) је дводимензиона - дуж оба правца где постоје граничне површине.
3. Спектар електрона у филм-структурата и квантним жицама поседује један доњи и један горњи енергетски геп. Последица постојања доњег енергетског гепа може да се тумачи на следећи начин: он одговара енергији основног стања електронског система и представља најмању енергију коју треба уложити да би у филму егзистирао електронски гас. Све до те енергије (активационе температуре) електрони се могу налазити само у неким од везаних стања. С друге стране, појаву горњег енергетског гепа можемо тумачити и тако да се у филм-структурата, за величину минималног енергетског гепа, „спушта” Фермијев ниво. Само електрони са енергијама већим од ове минималне, могу да учествују у транспортним и осталим физички интересантним процесима, па се лако може закључити да се то лакше остварује у филмовима, а још интензивније у жицама.
4. Све разлике између посматраних (неограниченih и ограничениh) кристалних система су израженије, што је филм тањи, а жица тања и ужа, и испчезавају када дебљина филма, односно дебљина и ширина квантне жице, тежи бесконачности.

6. Додатак:

Гринове функције и Чебишевљеви полиноми

У овом делу биће дате грубе основе теорије линеарног одзива и Гринових функција у физички кондензоване материје и кључни елементи Чебишевљевих полинома који се, као аналитичко решење, јављају у проблему примене метода Гринових функција на ограничено системе.

6.1. Метод Гринових функција

Познавање Гринових функција омогућава налажење енергије основног стања система, спектра и врсте елементарних побуђења, затим, термодинамичка својства у равнотежним и неравнотежним стањима посматраног система.

Веома битан задатак статистичке физике је налажење средњих вредности динамичких величине. За величину $\hat{A}(x, t)$ средња вредност се дефинише као:

$$\langle \hat{A}(x, t) \rangle_t = \text{Sp} \langle \hat{A}(x, t) \hat{\varrho}_t \rangle, \quad (6.1)$$

где је:

$$\hat{\varrho}_t = e^{\frac{H_0 t}{i\hbar}} \hat{S}(t, t_0) e^{-\frac{H_0 t}{i\hbar}} \quad (6.2)$$

неравнотежни статистички оператор, а ϱ_0 - равнотежни статистички оператор⁶. Ако се (6.1) замени у (6.2) и изврше две цикличне пермутације оператора, добија се:

$$\text{Sp} \langle \hat{A}(x, t) \hat{\varrho}_t \rangle = \text{Sp} \left\{ \hat{S}^{-1}(t, t_0) e^{-\frac{H_0 t}{i\hbar}} \hat{A}(x, t) e^{\frac{H_0 t}{i\hbar}} \hat{S}(t, t_0) \hat{\varrho}_0 \right\},$$

тј.:

$$\langle \hat{A}(x, t) \rangle_t = \langle \hat{S}^{-1}(t, t_0) \hat{A}(x, t) \hat{S}(t, t_0) \rangle_0, \quad (6.3)$$

где је

$$\hat{A}(x, t) = \exp \left(-\frac{H_0 t}{i\hbar} \right) \hat{A}(x, t) \exp \left(\frac{H_0 t}{i\hbar} \right)$$

Шредингеров оператор $\hat{A}(x, t)$, написан у репрезентацији интеракције. Писањем $\langle \dots \rangle_t$ означене су неравнотежне, а $\langle \dots \rangle_0$ равнотежне средње вредности. $\hat{S}(t, t_0)$ је унитарни оператор, тзв. матрица расејања:

$$\hat{S}(t, t_0) = \hat{T} \exp \left[\frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{W}(t') \right]. \quad (6.4)$$

Ако се \hat{S} -матрица развије у ред и задржи на прва два члана, што одговара линеарној апроксимацији по интеракцији $\hat{W}(t)$:

$$\hat{S}^{\pm 1}(t, t_0) = 1 \pm \frac{\hat{T}}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{W}(t'),$$

⁶За израчунавање неравнотежних средњих вредности најпогодније је користити равнотежни оператор великог каноничког ансамбла: $\hat{\varrho}_0 = e^{(\Omega + \mu \hat{N}_0 - \hat{N}_0)/\theta}$, јер је велика каноничка расподела најопштија (она укључује законе одржања средње енергије и средњег броја честица).

тада је

$$\langle \hat{A}(x, t) \rangle_t = \langle \hat{A}(x, t) \rangle_0 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \langle \hat{A}(x, t) \hat{T} \hat{W}(t') - \hat{T} \hat{W}(t') \hat{A}(x, t) \rangle_0 . \quad (6.5)$$

Како хронолошки оператор \hat{T} делује само на $\hat{W}(t')$, не мора се писати у горњем изразу. Израз има смисла само за $t > t'$, па се испред производа оператора \hat{A} и \hat{W} уводи Хевисајдова степ функција $\Theta(t - t')$, дефинисана на следећи начин:

$$\Theta(t - t') = \begin{cases} 1 & t > t' \\ 0 & t < t' \end{cases}$$

због чега израз (6.5) прелази у:

$$\langle \hat{A}(x, t) \rangle_t = \langle \hat{A}(x, t) \rangle_0 + L(t, t_0) , \quad (6.6)$$

где је:

$$L(t, t_0) = \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \Theta(t - t') \langle \hat{A}(x, t) \hat{W}(t') - \hat{W}(t') \hat{A}(x, t) \rangle_0 \quad (6.7)$$

и назива се линеарни одзив или реакција система на спољашњу пертурбацију $W(t)$.

Ради даље анализе линеарног одзива потребно је извршити конкретизацију $\hat{W}(t)$. Једна од општијих форми хамилтонијана спољашње пертурбације је:

$$\hat{H}_{int}(t') = \int dx' \hat{B}(x', t') \varepsilon(x', t') , \quad (6.8)$$

при чему су $\hat{B}(x', t')$ - оператори неке динамичке варијабле B , а $\varepsilon(x', t')$ - функције које немају операторску структуру и понекад се називају C - бројевима. Како је:

$$\hat{W}(t) = \exp \left(-\frac{H_0 t}{i\hbar} \right) \hat{H}_{int}(t) \exp \left(\frac{H_0 t}{i\hbar} \right) , \quad (6.9)$$

на основу (6.8) и (6.9) оператор $W(t')$ ће бити:

$$\hat{W}(t') = \int dx' \hat{B}(x', t') \varepsilon(x', t') , \quad (6.10)$$

где је

$$\hat{B}(x', t') = \exp \left(-\frac{H_0 t}{i\hbar} \right) \hat{B}(x', t') \exp \left(\frac{H_0 t}{i\hbar} \right) \quad (6.11)$$

Шредингеров оператор написан у репрезентацији интеракције. Заменом (6.10) у (6.7) добија се:

$$L(t, t_0) = \frac{1}{i\hbar} \int dx' \int_{t_0}^t dt' \varepsilon(x', t') G(x, x'; t, t') , \quad (6.12)$$

где је величина:

$$G(x, x'; t, t') \equiv \Theta(t - t') \langle \hat{A}(x, t) \hat{B}(x', t') - \hat{B}(x', t') \hat{A}(x, t) \rangle_0 \quad (6.13)$$

и назива се двовременска температурска ретардovана функција Грина. Она зависи од $6N + 2$ -е променљиве (два пута по три просторне и две временске). Ако је простор хомоген (без дефеката, примеса итд.) онда Гринова функција, као његова физичка карактеристика, не зависи од конфигурационих координата x и x' понаособ, већ од њихове разлике $x - x'$, па се број променљивих своди на $3N + 2$. Ако оригинални оператори не зависе експлицитно од времена, тј. $\hat{A}(x, t) \equiv \hat{A}(x)$ и $\hat{B}(x, t) \equiv \hat{B}(x)$ тада Гринова функција не зависи од временских координата t и t' понаособ, већ од њихове разлике $t - t'$ и укупан број променљивих се своди на $3N + 1$. У том случају Гринова функција (6.13) прелази у:

$$\begin{aligned} G(x, x'; t, t') &\longrightarrow G(x - x', t - t') = \\ &= \Theta(t - t') [\mathcal{J}_{AB}(x - x', t - t') - \mathcal{J}_{BA}(x - x', t - t')] . \end{aligned} \quad (6.14)$$

Овде су уведене корелационе функције:

$$\mathcal{J}_{AB}(x - x', t - t') = \langle \hat{A}(x, t) \hat{B}(x', t') \rangle_0 ; \quad \mathcal{J}_{BA}(x - x', t - t') = \langle \hat{B}(x', t') \hat{A}(x, t) \rangle_0 \quad (6.15)$$

које у себи садрже сву неопходну информацију о својствима посматраног система. Управо из овог разлога метод Гринових функција има изузетан значај у теоријској физици кондензоване материје.

Ако се изврши симболичка смена: $x \rightarrow \vec{n}$ и $x' \rightarrow \vec{m}$ и постави услов $t' = 0$, израз за Гринову функцију може да се напише у следећем облику:

$$G_{\vec{n}\vec{m}}(t) \equiv \langle \langle \hat{A}_{\vec{n}}(t) \mid \hat{B}_{\vec{m}}(0) \rangle \rangle = \Theta(t) \langle [\hat{A}_{\vec{n}}(t), \hat{B}_{\vec{m}}(0)] \rangle_0 . \quad (6.16)$$

За најраспрострањенији начин израчунавања корелационих функција, па према томе и свих релевантних карактеристика система, сматра се метод једначина кретања за Гринове функције:

$$\frac{d}{dt} G_{\vec{n}\vec{m}}(t) = \frac{d}{dt} \Theta(t) \langle [\hat{A}_{\vec{n}}(t), \hat{B}_{\vec{m}}(0)] \rangle_0 + \Theta(t) \langle \left[\frac{d\hat{A}_{\vec{n}}(t)}{dt}, \hat{B}_{\vec{m}}(0) \right] \rangle_0 . \quad (6.17)$$

Коришћењем Хајзенбергових једначина кретања $i\hbar \frac{d}{dt} \hat{A}(t) = [\hat{A}(t), \hat{H}(t)]$ за операторе физичких величина и основних дефиниција $\frac{d}{dt} \Theta(t) = \delta(t)$, $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, овај израз се своди на:

$$i\hbar \frac{d}{dt} G_{\vec{n}\vec{m}}(t) = i\hbar \delta(t) C_{\vec{n}\vec{m}} + \langle \langle [\hat{A}_{\vec{n}}(t), H(t)] \mid \hat{B}_{\vec{m}}(0) \rangle \rangle , \quad (6.18)$$

где је $C_{\vec{n}\vec{m}}$ корелациона функција, $C_{\vec{n}\vec{m}} \equiv \langle [\hat{A}_{\vec{n}}(t), \hat{B}_{\vec{m}}(0)] \rangle$.

Интересантно је још подвучи да Гринове функције имају и дубљи физички смисао. Наиме, реални делови њихових полова представљају енергије елементарних побуђења док реципрочне вредности имагинарних делова њихових полова одређују времена живота тих експитација.

6.2. Карактеристични полиноми Чебишева

Карактеристичне детерминантне облика:

$$\mathcal{P}_n(x) = \begin{vmatrix} x & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & x & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & x & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & x & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & x & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & x \end{vmatrix}_n \quad (6.19)$$

које одговарају различитим вредностима, $n = 2, 3, 4, \dots, N$ уз претпостављене почетне услове:

$$\mathcal{P}_0(x) = 1 ; \quad \mathcal{P}_1(x) = x , \quad (6.20)$$

задовољавају следећу рекурентну релацију⁷:

$$\mathcal{P}_{n+1}(x) = x\mathcal{P}_n(x) - \mathcal{P}_{n-1}(x) \quad (6.21)$$

и називају се Чебишевљевим полиномима друге врсте.

Уводећи смену: $x = 2\cos\varphi$, детерминанта (6.19) може се аналитички трансформисати у:

$$\mathcal{P}_n(x) \longrightarrow \mathcal{P}_n(\varphi) = \frac{\sin[(n+1)\varphi]}{\sin(\varphi)} ; \quad \varphi \neq 0 . \quad (6.22)$$

Нуле Чебишевљевих полинома, које следе из услова:

$$\mathcal{P}_n(\varphi) \equiv 0 , \quad (6.23)$$

дефинисане су релацијом:

$$\varphi_\nu = \frac{\pi}{n+1} \nu ; \quad \nu = 1, 2, 3, \dots, n \quad (6.24)$$

и имају посебног физичког значаја јер дефинишу полове (сингуларитете) Гринових функција, а они, са своје стране, енергије елементарних ексцитација и време њиховог живота.

⁷Она представља хомогену диференцијалну једначину другог реда са константним коефицијентима.

7. Литература

1. Б.С.Топић: СТАТИСТИЧКА ФИЗИКА,
ПМФ ИФ, Нови Сад 1978.
2. И.Супек: ТЕОРИЈСКА ФИЗИКА И СТРУКТУРА МАТЕРИЈЕ,
Школска књига, Загреб 1977.
3. А.С.Давыдов: ТЕОРИЯ ТВЕРДОГО ТЕЛА,
Наука, Москва 1976.
4. Ч.Киттел: УВОД У ФИЗИКУ ЧВРСТОГ СТАЊА,
Сав.Админ. Београд 1970.
5. М.И.Каганов: ЕЛЕКТРОНЫ, ФОНОНЫ, МАГНОНЫ,
Наука, Москва 1979.
6. Љ.Ристовски: ТЕОРИЈА КОНДЕНЗОВАНОГ СТАЊА,
Физички факултет, Београд 1994.
7. Д.Раковић: ФИЗИЧКЕ ОСНОВЕ И КАРАКТЕРИСТИКЕ
ЕЛЕКТРОТЕХНИЧКИХ МАТЕРИЈАЛА,
Електротехнички факултет, Београд 1995.
8. Ж.А.Спасојевић и З.В.Поповић: ЕЛЕКТРОТЕХНИЧКИ
И ЕЛЕКТРОНСКИ МАТЕРИЈАЛИ,
Промезза, Београд 1995.
9. С.М.Стојковић: СПЕКТРИ И СТАЊА НОСИЛАЦА НАЕЛЕКТРИСАЊА
И ТРАНСПОРТНЕ КАРАКТЕРИСТИКЕ КВАЗИДВИМЕНЗИОНИХ
СУПЕРПРОВОДНИХ МАТЕРИЈАЛА,
Мр теза, ЕТФ Београд 1997.
10. Д.Шијачић: ЕЛЕКТРОНСКА КОНФИГУРАЦИЈА
У КРИСТАЛНИМ ФИЛМОВИМА,
Дипл. рад, ПМФ Нови Сад 1998.
11. D.Lj.Mirjanić, S.M.Stojković, J.P.Šetrajićić and S.K.Jaćimovski
ELECTRON SPECTRA IN CRYSTAL FILMS
Proceedings 20th MIEL, 1, 177-179 (1995).
12. Ј.П.Шетрајчић, Д.Љ.Мирјанић, З.В.Бундало, З.Рајилић, С.Лазарев,
М.Пантић, В.М.Зорић, Н.В.Делић, А.С.Утјешановић,
С.М.Стојковић, С.К.Јаћимовски, И.Д.Враговић и А.Славковић
СПЕКТРИ И СТАЊА ФОНОНА И ЕЛЕКТРОНА
У ЈЕДНОСЛОЈНИМ КРИСТАЛНИМ СТРУКТУРАМА
СФИН, 9 102-112 (1996).

УНИВЕРЗИТЕТ У НОВОМ САДУ
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ
КЉУЧНА ДОКУМЕНТАЦИЈСКА ИНФОРМАЦИЈА

- Редни број:
РБР
- Идентификациони број:
ИБР
- Тип документације:
Монографска документација
ТД
- Тип записа:
Текстуални штампани материјал
ТЗ
- Врста рада: Дипломски рад
ВР
- Аутор: Градимир Шушак, бр.дос.409/88
АУ
- Ментор: Др Јован Шетрајчић,
редовни професор, ПМФ, Нови Сад
МН
- Наслов рада: Електронски спектри
нискодимензионих кристала
НР
- Језик публикације: Српски (Ћирилица)
ЈП
- Језик извода: Српски
ЈИ
- Земља публиковања: Југославија
ЗП
- У же географско подручје: Војводина
УГП
- Година: 1998.
ГО
- Издавач: Ауторски репрнт
ИЗ
- Место и адреса: Природно-математички
факултет, Трг Доситеја Обрадовића 4,
21000 Нови Сад
МА
- Физички опис рада: (7/27/12/0/1/0/2)
ФО
- Научна област: Физика
НО
- Научна дисциплина: Физика чврстог
стања
НД
- Предметна
одредница / кључне речи: кристални фил-
мови, квантне жице, електрони, Гринове
функције, спектри, гепови
ПО
- Чува се: Библиотека Института за
физику, ПМФ, Нови Сад
- Извод: У раду је примењен метод Гри-
нових функција за испитивање утица-
ја граница нискодимензионих система
(филм-структура и квантних жица) на
енергетски спектар и могућа стања елек-
трана. Извршена су поређења тих ре-
зултата са одговарајућим у идејним
бесконачним структурима. Најзначај-
нија разлика између посматраних сис-
тема је појава енергетских гепова као
искључива последица ограничености нис-
кодимензионих структура.
ИЗ
- Датум прихватања теме од стране Већа:
11.06.1998.
ДП
- Датум одбране: 11.09.1998.
ДО
- Чланови комисије:
Председник:
Др Љиљана Машковић,
ванр. професор, ПМФ, Нови Сад
Чланови:
Др Јован Шетрајчић,
редовни професор, ПМФ, Нови Сад
Др Божидар Вујичић,
редовни професор, ПМФ, Нови Сад
КО