

Природно-математички факултет
Радна заједница аједничких послова'
НОВИ САД

Примљено: 27 марта 1995			
Орг. јед.	Број	Прилог	Званичност
0603	9/40		

UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET
INSTITUT ZA FIZIKU

Jugoslav Bogdanović

GRINOVE FUNKCIJE FONONSKOG SISTEMA U FILM-STRUKTURAMA

- DIPLOMSKI RAD -

NOVI SAD, 1995.

*Svaki put samo je put, i nemoj se ustezati da ga napustiš
ako ti srce kaže da to učiniš ... Pažljivo osmotri svaki put.
Oprobaj ga koliko god puta smatraš da je potrebno.
A onda upitaj sebe i samo sebe ... Ima li ovaj put srca?
Ako ima, onda je taj put dobar; ako nema, uzaludno je
traći život na njega.*

Karlos Kastaneda

Ovaj rad je izradjen u Laboratoriji za teorijsku fiziku,
Instituta za fiziku Prirodno-matematičkog fakulteta u
Novom Sadu, pod mentorstvom prof. dr Jovana Šetrajčića.

Pravu meru zahvalnosti u odnosu na altruizam svog mentora još uvek tražim.

SADRŽAJ

	Strana
1. UVOD	4
2. POJAM I OSOBINE GRINOVIH FUNKCIJA	6
3. FONONI U NEOGRANIČENIM STRUKTURAMA	11
4. FONONI U KRISTALNIM FILMOVIMA	23
5. ZAKLJUČAK	36
6. DODATAK	37
7. LITERATURA	38

1. U V O D

U teorijskoj fizici čvrstog stanja najčešće se analiziraju idealne kristalne strukture, koje su prostorno homogene i translaciono invarijantne. Poznato je, međutim, da ovakve strukture u prirodi ne postoje. Kristali imaju granične površine na kojima dolazi do specifičnih efekata i fizičkih fenomena bitnih za praktičnu primenu. Usled postojanja graničnih površina, kaže se da je kod ovih struktura translaciona simetrija narušena. Pored toga, na narušenje simetrije utiču i nečistoće (primese, defekti, vakancije).

Opšti cilj ovog rada je istraživanje energetskih spektara fononskog sistema u strukturama koje imaju dve medjusobno paralelne granične površine. Strukture, koje poseduju ograničenja (u napred navedenom smislu) po jednom pravcu, nazivaju se filmovi.

Šta su fononi?

Analogno fotonu koji predstavlja kvant energije elektromagnetskog talasa uvodi se fonon kao kvant energije vibracije kristalne rešetke ili elastičnog talasa. Zvučni talasi u kristalima su "sastavljeni" od fonona. Toplotne vibracije u kristalima su toplotno pobudjeni (kreirani) fononi - analogno toplotno pobudjenim fotonima elektromagnetskog zračenja crnog tela. Nikakav eksperiment, direktno analogan fotoelektričnom, nije do sada izveden sa fononima. Fotoelektrični efekat ne potvrđuje da je foton čestica, već pokazuje da elektromagnetno polje vrši razmenu energije sa drugim sistemima u nedeljivim elementarnim iznosima $\hbar\omega$. Ovo pokazuje da se energija elektromagnetskog polja kvantuje. Ovakvo isto razmatranje važi i za elastične talase - fonone, tj. i oni su kvantovani.

Fononi su osnovna pobudjenja u kristalu, oni su uvek prisutni podsistem bez obzira da li se radi o elektronima, eksitonima, feroelektričnim pobudjenjima ili nekom drugom tipu elementarne ekscitacije kao glavnom nosiocu mehanizama koji "proizvode" odredjene fizičke osobine, pojave i efekte u kristalu. Takodje, fononi kao podsistem se lako termalno pobudjuju, pa su već sa malim porastom temperature iznad 0K oni prisutni. Utoliko ih je značajno prve ispitivati.

Analiza fononskih spektara, prvo u neograničenim (beskonačnim) a potom u tankim ili film-strukturama, biće sprovedena metodom Grinovih funkcija, koji predstavlja jedan u nizu metoda pomoću kojih se ova problematika može tretirati (pored: metoda malih perturbacija, metoda Hajzenbergovih jednačina kretanja, metoda talasnih funkcija . . .). Odabran je zbog pogodnosti koje nam nudi definicija polova Grinove funkcije, i to:

- a) realni delovi polova, proporcionalni su energijama elementarnih ekscitacija (pobudjenja) koje se javljaju u sistemu (daju nam zakon disperzije fonona);
- b) imaginarni delovi polova (nema ih kod fonona, jer su oni dugoživeće čestice) proporcionalni su recipročnoj vrednosti vremena života tih ekscitacija.

Hronologija istraživanja utvrđena je sa namerom da se rezultati dobijeni primenom odabranog metoda na kristalne filmove, mogu uporediti sa odgovarajućim, dobijenim za idealne neograničene strukture, kako bi se uočile razlike i pozitivne osobine istakle.

2. POJAM I OSOBINE GRINOVIH FUNKCIJA

Uvodjenje pojma Grinovih funkcija, biće u daljem tekstu učinjeno, u skladu sa potrebama ovog istraživanja. Ograničićemo se na upoznavanje osnovnih osobina, Grinovih funkcija koje se primenjuju u teorijskoj fizici čvrstog stanja.

Jedan od osnovnih zadataka statističke fizike je nalaženje srednjih vrednosti dinamičkih veličina. Tako se za veličinu $\hat{A}(x, t)$ definiše srednja vrednost:

$$\langle \hat{A}(x, t) \rangle_t = \langle \hat{S}^{-1}(t, t_0) \hat{A}(x, t) \hat{S}(t, t_0) \rangle_0 , \quad (2.1)$$

gde je

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

Šredingerov operator napisan u reprezentaciji interakcije, a $\langle \cdot \cdot \cdot \rangle_0$ označava ravnotežnu srednju vrednost odgovarajuće veličine. $\hat{S}(t, t_0)$ je unitarni operator - matrica rasejanja. Treba napomenuti da se za nalaženje ovih srednjih vrednosti mora koristiti statistički ravnotežni operator velikog kanonskog ansambla: $\hat{\rho}_0 = \exp[(\Phi + \mu N_0 - H_0) \theta^{-1}]$; $\theta = k_B T$, jer je velika kanonska raspodela najopštija (ona uključuje zakone održanja i srednje energije i srednjeg broja čestica).

Ako se \hat{S} -matrica (koja predstavlja beskonačni operatorski red) razvije u red i zadrži na prva dva člana, što odgovara linearnoj aproksimaciji po interakciji $\hat{W}(t)$:

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

tada je

$$\langle \hat{A}(x, t) \rangle_t = \langle \hat{A}(x, t) \rangle_0 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \langle \hat{A}(x, t) \hat{T} \hat{W}(t') - \hat{T} \hat{W}(t') \hat{A}(x, t) \rangle_0 \quad (2.2)$$

Hronološki operator \hat{T} deluje samo na $\hat{W}(t')$ pa se on ne mora ni pisati jer ovaj izraz ima smisla samo za $t > t'$. Zato se uvodi Hevisajdova step funkcija

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

pa izraz (2.2) prelazi u:

$$\langle \hat{A}(x, t) \rangle_t = \langle \hat{A}(x, t) \rangle_0 + L(t, t_0) \quad (2.3)$$

pri čemu se veličina

$$L(t, t_0) = \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \Theta(t - t') \langle \hat{A}(x, t) \hat{W}(t') - \hat{W}(t') \hat{A}(x, t) \rangle_0 \quad (2.4)$$

naziva linearni odziv sistema.

Ako se operator interakcije predstavi u obliku:

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

gde je

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

Šredingerov operator napisan u reprezentaciji interakcije, a funkcije $\varepsilon(x', t')$ nemaju operatorsku strukturu i nazivaju se C-brojevima, onda se linearni odziv može napisati kao:

$$L(t, t_0) = \frac{1}{i\hbar} \int dx' \int_{t_0}^t dt' \varepsilon(x', t') G(x, x'; t, t') \quad (2.5)$$

Veličina

$$G(x, x'; t, t') = \Theta(t - t') \langle \hat{A}(x, t) \hat{\mathcal{B}}(x', t') - \hat{\mathcal{B}}(x', t') \hat{A}(x, t) \rangle_0 \quad (2.6)$$

se naziva dvovremenska temperaturska retardovana funkcija Grina. Ona zavisi od $6N + 2$ promenljive (dva puta po tri prostorne i dve vremenske). Ako je prostor homogen (bez defekata, primesa itd) onda Grinova funkcija, kao njegova fizička karakteristika, ne zavisi od konfiguracionih koordinata x i x' ponaosob, već od njihove razlike $x - x'$ pa se broj promenljivih svodi na $3N + 2$. Ako originalni operatori ne zavise eksplicitno od vremena, tj. $\hat{A}(x, t) \equiv \hat{A}(x)$ i $\hat{B}(x, t) \equiv \hat{B}(x)$ tada Grinova funkcija ne zavisi od vremenskih koordinata t i t' ponaosob, već od njihove razlike $t - t'$ i ukupan broj promenljivih se svodi na $3N + 1$. U tom slučaju Grinova funkcija (2.6) prelazi u:

$$\begin{aligned}
G(x, x'; t, t') &\longrightarrow G(x - x', t - t') = \\
&= \Theta(t - t') [\mathcal{J}_{AB}(x - x', t - t') - \mathcal{J}_{BA}(x - x', t - t')] \quad (2.7)
\end{aligned}$$

Ovde su uvedene korelacione funkcije:

$$\begin{aligned}
\mathcal{J}_{AB}(x - x', t - t') &= \langle \hat{\mathcal{A}}(x, t) \hat{\mathcal{B}}(x', t') \rangle_0 ; \\
\mathcal{J}_{BA}(x - x', t - t') &= \langle \hat{\mathcal{B}}(x', t') \hat{\mathcal{A}}(x, t) \rangle_0 \quad (2.8)
\end{aligned}$$

koje u sebi sadrže svu neophodnu informaciju o svojstvima posmatranog sistema. Upravo iz ovog razloga metod Grinovih funkcija ima izuzetan značaj u teorijskoj fizici kondenzovane materije.

Ako se izvrši simbolička smena: $x \rightarrow \vec{n}$ i $x' \rightarrow \vec{m}$ izraz za Grinovu funkciju može da se napiše u sledećem obliku:

$$G_{\vec{n}, \vec{m}}(t - t') \equiv \langle \langle \hat{\mathcal{A}}_{\vec{n}}(t) \mid \hat{\mathcal{B}}_{\vec{m}}(t') \rangle \rangle = \Theta(t - t') \langle [\hat{\mathcal{A}}_{\vec{n}}(t), \hat{\mathcal{B}}_{\vec{m}}(t')] \rangle_0 \quad (2.9)$$

Za najrasprostranjeniji način izračunavanja korelacionih funkcija, pa prema tome i svih relevantnih karakteristika sistema, smatra se metod jednačina kretanja za funkcije Grina. Za dvovremenske temepraturski zavisne Grinove funkcije njega su razvili Bogoljubov i Tjablikov 1959. godine:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} G_{\vec{n}, \vec{m}}(t - t') &= \left[\frac{d}{dt} \Theta(t - t') \right] \langle [\hat{\mathcal{A}}_{\vec{n}}(t), \hat{\mathcal{B}}_{\vec{m}}(t')] \rangle_0 + \\
&+ \Theta(t - t') \langle \left[\frac{d \hat{\mathcal{A}}_{\vec{n}}(t)}{dt}, \hat{\mathcal{B}}_{\vec{m}}(t') \right] \rangle_0 \quad (2.10)
\end{aligned}$$

Korišćenjem Hajzenbergovih jednačina kretanja za operatore fizičkih veličina i osnovnih definicija:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\mathcal{A}} = [\hat{\mathcal{A}}, H(t)] ; \quad \frac{d}{dt} \Theta(t - t') = \delta(t - t') ; \quad [\hat{\mathcal{A}}, \hat{\mathcal{B}}] = \hat{\mathcal{A}}\hat{\mathcal{B}} - \hat{\mathcal{B}}\hat{\mathcal{A}}$$

ovaj izraz se svodi na:

$$i\hbar \frac{d}{dt} G_{\vec{n}, \vec{m}}(t - t') = i\hbar \delta(t - t') C_{\vec{n}, \vec{m}} + \langle \langle [\hat{\mathcal{A}}_{\vec{n}}(t), H(t)] \mid \hat{\mathcal{B}}_{\vec{m}}(t') \rangle \rangle \quad (2.11)$$

gde je $C_{\vec{n}, \vec{m}}$ korelaciona funkcija, čija definicija

$$C_{\vec{n}, \vec{m}} = \langle [\hat{A}_{\vec{n}}(t), \hat{B}_{\vec{m}}(t')] \rangle_0$$

ima smisla samo zajedno sa delta funkcijom $\delta(t - t')$.

Primenom vremenske Furijeove transformacije

$$G_{\vec{n}, \vec{m}}(t - t') = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega(t-t')} G_{\vec{n}, \vec{m}}(\omega) \quad (2.12)$$

jednačina (2.11) prelazi u

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega(t-t')} & \left\{ \frac{i\hbar}{2\pi} C_{\vec{n}, \vec{m}} - \hbar\omega G_{\vec{n}, \vec{m}}(\omega) + \right. \\ & \left. + \langle \langle [\hat{A}_{\vec{n}}(t), H(t)] \mid \hat{B}_{\vec{m}}(t') \rangle \rangle_\omega \right\} = 0 \end{aligned}$$

koja je zadovljena samo ukoliko je izraz u vitičastoj zagradi jednak nuli. Odатле sledi:

$$\hbar\omega G_{\vec{n}, \vec{m}}(\omega) = \frac{i\hbar}{2\pi} C_{\vec{n}, \vec{m}} + \langle \langle [\hat{A}_{\vec{n}}(t), H(t)] \mid \hat{B}_{\vec{m}}(t') \rangle \rangle_\omega \quad (2.13)$$

Vidi se da se Grinova funkcija $G_{\vec{n}, \vec{m}}(\omega) \equiv \langle \langle [\hat{A}_{\vec{n}}(t) \mid \hat{B}_{\vec{m}}(t')] \rangle \rangle_\omega$ izražava preko nove - više Grinove funkcije $\langle \langle [\hat{A}_{\vec{n}}(t), H(t)] \mid \hat{B}_{\vec{m}}(t') \rangle \rangle_\omega$. Više Grinove funkcije se računaju na isti način kao i obične (pomoću jednačina kretanja) te se tako dobija beskonačan niz, tzv. hijerarhija vezanih jednačina za određivanje Grinove funkcije.

Da bi se i izračunala tražena jednočestična, a redje dvočestična Grinova funkcija, mora se ovaj beskonačan red negde prekinuti korišćenjem neke dovoljno opravdane aproksimacije. Najčešće se ona uvodi u sledećem obliku:

$$\langle \langle [\hat{A}_{\vec{n}}(t), H(t)] \mid \hat{B}_{\vec{m}}(t') \rangle \rangle_\omega \approx \hbar\Omega_{\vec{n}, \vec{m}} \langle \langle \hat{A}_{\vec{n}}(t) \mid \hat{B}_{\vec{m}}(t') \rangle \rangle_\omega \quad (2.14)$$

nakon čega se (2.13) svodi na

$$G_{\vec{n}, \vec{m}}(\omega) = \frac{i}{2\pi} \frac{C_{\vec{n}, \vec{m}}}{\omega - \Omega_{\vec{n}, \vec{m}}} \quad (2.15)$$

Vidi se da posmatrana Grinova funkcija ima jednostrukе polove po ω . U strožjoj aproksimaciji ona će imati višestruke polove, odnosno, biće oblika:

$$G(\omega) \sim \frac{P(\omega)}{Q(\omega - \Omega_j)} \quad (2.16)$$

gde su P i Q polinomi čije se nule ne poklapaju. Pri tome, uslov $\omega = \Omega_j$, definiše sve singularitete Grinove funkcije, a množenjem datih frekvencija sa \hbar , dobijaju se odgovarajuće energije elementarnih ekscitacija koje se javljaju u sistemu.

U nastavku (glava 4.) će biti pokazano da se, polazeći od standardnog hamiltonijana za fononski podsistem, te korišćenjem opisanog metoda, dolazi do sistema jednačina za određivanje Grinovih funkcija. Determinanta tog sistema može se izraziti pomoću odgovarajućih polinoma Čebiševa. Nule determinante predstavljaju polove Grinovih funkcija i definišu zakon disperzije fonona u posmatranoj film-strukturi.

Pored toga, neophodno je dati vezu izmedju Grinovih funkcija i korelacionih funkcija koje, kao što je napred već rečeno, definišu i sve ostale fizičke karakteristike posmatranog sistema.. Ova veza se izražava preko spektralne teoreme:

$$\lim_{\delta \rightarrow +0} [G_{\vec{n}, \vec{m}}(\omega + i\delta) - G_{\vec{n}, \vec{m}}(\omega - i\delta)] = (e^{\hbar\omega/\theta} - 1) \mathcal{J}_{BA}^{\vec{n}, \vec{m}}(\omega) \quad (2.17)$$

gde je $\mathcal{J}_{BA}^{\vec{n}, \vec{m}}(\omega)$ Furieov transform korelace funkcije $\mathcal{J}_{BA}^{\vec{n}, \vec{m}}(t - t')$. Za $t = t' = 0$ korelace funkcije (2.8) zapravo predstavljaju srednje vrednosti proizvoda odgovarajućih operatora fizičkih veličina.

Znači, poznavanje Grinovih funkcija omogućava nalaženje energija i vremena života (dakle i vrsta) elementarnih pobudjenja, te određivanje termodinamičkih svojstava posmatranog sistema u ravnotežnim i neravnotežnim stanjima.

3. FONONI U NEOGRANIČENIM STRUKTURAMA

Pre formiranja odgovarajućeg hamiltonijana za fononski podsistem, te nakon toga, primene opisanog matematičkog metoda na njega, za slučaj idealnih neograničenih struktura, biće dat jedan opšti prikaz dešavanja u kristalnim sistemima, u nameri da se pojam **fonona** uvede u skladu sa potrebama koje nameću, dubina ovog istraživanja i odgovarajuća forma.

Najprostiji tip kretanja u čvrstom telu je oscilatorno kretanje atoma ili molekula oko ravnotežnih položaja. Kao rezultat interakcije izmedju čestica, kretanje jednog atoma je "u zagrljaju" susednih atoma i povezano je sa kretanjem svih atoma u kristalu. Odatle sledi da se talasni poremećaji svih atoma (a ne pojedinih) mogu smatrati osnovnom formom kretanja atoma u sistemu. Ovi talasni poremećaji su okarakterisani talasnom dužinom λ i frekvencijom ω . Frekvencija je funkcija talasnog vektora (\vec{k}), a ovo periodično kretanje atoma u kristalnoj rešetki je posledica periodične zavisnosti frekvencije od talasnog vektora \vec{k} , koji definiše pravac prostiranja poremećaja.

Kvantna karakteristika talasa je ukazala na postojanje minimalnog energetskog iznosa vibracija kristala sa datom frekvencijom. To omogućava da se uvedu specifične kvazičestice - fononi.

Pojam fonona se inače uvodi prilikom kvantnomehaničkih analiza linearog oscilatora. Energija linearog oscilatora ima oblik:

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

a priraštaj energije pri prelasku iz stanja n u stanje $n + 1$ iznosi:

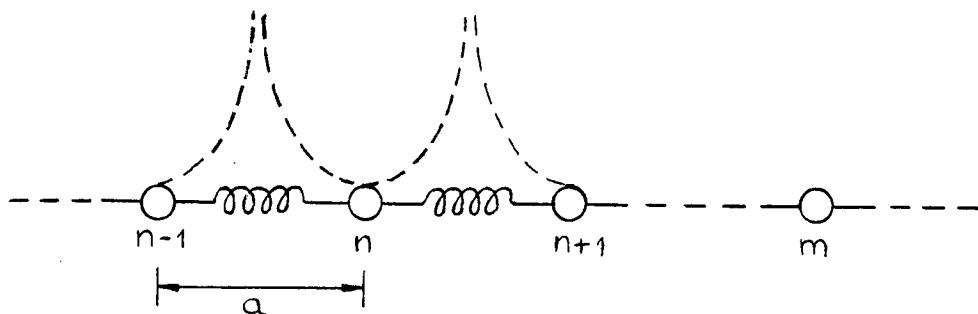
$$E_{n+1} - E_n = \hbar\omega$$

Ovaj kvant pobuđenja linearног oscilatora, čija energija iznosi $\hbar\omega$ (a impuls, $\vec{p} = \hbar\vec{k}$), naziva se - fononom. Njegova energija zavisi od mase M oscilatora i konstante C koja karakteriše elastičnu silu oscilatora tj.

$$\hbar\omega = \hbar\sqrt{\frac{C}{M}}.$$

Fononi opisuju oscilatorno kretanje atoma u kristalu, ali nekompletno zbog toga što predstavljaju samo kretanje oko ravnotežnih položaja, a u kristalu postoje i drugi tipovi elementarnih pobudjenja ili kvazičestica. Oni se kao kvazičestice mogu eksperimentalno detektovati, a njihov broj raste sa porastom temperature što se ogleda u povećanju amplitude oscilovanja atoma. Za razliku od realnih čestica, karakteristike kvazičestica zavise od karakteristika okoline tog kristala; atoma, molekula ili jona poredjanih periodično u prostoru.

Jednodimenzionalni niz atoma iste mase na jednakim medjusobnim rastojanjima (u položaju ravnoteže) koji vrše male oscilacije oko svojih ravnotežnih položaja duž linije po kojoj su rasporedjeni, predstavlja jednodimenzionalni model kristala. Iako takvih kristala u prirodi nema, razmatranje ovog modela omogućava da se shvati priroda kretanja u realnim kristalima. Posmatranjem kretanja atoma može se pokazati da je taj sistem ekvivalentan jednom skupu medjusobno zavisnih oscilatora.



Slika 3.1

Da bi se napisao hamiltonijan fononskog podsistema, posmatra se najjednostavniji monoatomni kristal (slika 3.1):

$$H = \sum_{\vec{n}} H_{\vec{n}} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}, \vec{m}} V(\vec{n} - \vec{m}) , \quad (3.1)$$

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

Atomi ovakve kristalne rešetke osciluju oko svojih ravnotežnih položaja zbog elastičnih sila kojima na svaki atom (molekul) deluju ostali iz kristalne rešetke, pa se kristal može tretirati kao sistem povezanih oscilatora. Oscilovanje jednog atoma pomoću elastičnih medjuatomskih veza se prenosi na susedne i tako se formira mehanički talas. Energija tog elastičnog talasa može imati samo diskretnе vrednosti $\hbar\omega (n + \frac{1}{2})$; $n = 0, 1, 2, \dots$

Zbog medjusobne povezanosti, jedan atom trpi uticaj svih ostalih atoma koji ga okružuju, pa zbog kvantovanosti toga oscilovanja svaki kvant nosi pečat celokupnog kolektiva atoma, te se u kristalu ne može govoriti o fononima kao pobudjenjima individualnih atoma već o fononima koji predstavljaju kvante oscilovanja celog kristala.

Sve moguće oscilacije medjusobno spregnutih atoma mogu se predstaviti kao skup interagujućih elastičnih talasa, različitih talasnih dužina (frekvencija, energija, . . .) koji se prostiru u celoj zapremini kristala. Pošto je kristal ograničenih dimenzija, na datoј temperaturi, uspostaviće se stanje stacionarnih oscilacija koje predstavlja superpoziciju harmonijskih ravnih talasa - **stojeći talasi**.

Ispitivanje oscilatornih karakteristika kristala, u matematičkom smislu, svodi se na traženje takve unitarne transformacije koja bi hamiltonijan sistema vezanih oscilatora prevela u ekvivalentni hamiltonijan sistema nezavisnih oscilatora.

Izraz za interakcioni član u (3.1), koji predstavlja potencijalnu energiju kristala:

$$U = \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}, \vec{m}} V(\vec{n} - \vec{m}) \quad (3.2)$$

ispravan je samo na apsolutnoj nuli, tj. za "zamrznuti" kristal. Ako se temperatura povisi atomi počinju da osciluju tako da

$$\vec{n} \rightarrow \vec{n} + \vec{u}(\vec{n}), \quad \vec{m} \rightarrow \vec{m} + \vec{u}(\vec{m}) \quad (3.3)$$

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

$$V(\vec{n} - \vec{m}) \rightarrow V \{ (\vec{n} - \vec{m}) + [\vec{u}(\vec{n}) - \vec{u}(\vec{m})] \} . \quad (3.4)$$

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

$$\begin{aligned}
V \{ (\vec{n} - \vec{m}) + [(\vec{u}(\vec{n}) - \vec{u}(\vec{m})] \} &= V_0(\vec{n} - \vec{m}) + \\
&+ \sum_{\alpha; \vec{n}, \vec{m}} \left[\frac{\partial V(\vec{n} - \vec{m})}{\partial(\vec{n} - \vec{m})_\alpha} \right]_0 [u_\alpha(\vec{n}) - u_\alpha(\vec{m})] \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta; \vec{n}, \vec{m}} \left[\frac{\partial^2 V(\vec{n} - \vec{m})}{\partial(\vec{n} - \vec{m})_\alpha \partial(\vec{n} - \vec{m})_\beta} \right]_0 [u_\alpha(\vec{n}) - u_\alpha(\vec{m})] [u_\beta(\vec{n}) - u_\beta(\vec{m})] + \dots
\end{aligned} \tag{3.5}$$

α i β označavaju moguće projekcije vektora na ose Dekartovog sistema.

Svaki atom leži u nekoj potencijalnoj jami (kao na slici 3.1), pa iz uslova stabilnosti kristala sledi da je drugi sabirak s desne strane znaka jednakosti u izrazu (3.5) jednak nuli. Dakle, oscilovanje karakteriše samo treći sabirak u izrazu (3.5), 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:

$$H = \sum_{\alpha; \vec{n}} \frac{M}{2} \dot{u}_\alpha^2(\vec{n}) + \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta; \vec{n}, \vec{m}} C_{\alpha\beta}(\vec{n} - \vec{m}) [u_\alpha(\vec{n}) - u_\alpha(\vec{m})] [u_\beta(\vec{n}) - u_\beta(\vec{m})] \tag{3.6}$$

gde su

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

- Hukove konstante elastičnosti.

Pošto sile koje deluju izmedju atoma najčešće brzo opadaju sa porastom rastojanja $|\vec{n} - \vec{m}|$ izmedju atoma¹, to se izraz za potencijalnu energiju može napisati na sledeći način:

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

Tada se izraz za potencijalnu energiju u (3.6) može napisati u aproksimaciji najbližih suseda, koja se sastoji u zameni sumiranja $\vec{n}, \vec{m} \rightarrow \vec{n}, \vec{n} \pm \vec{\lambda}$, gde $\vec{\lambda}$ povezuje atom na mestu \vec{n} sa njegovim najbližim susedima. Kako je intenzitet $\vec{\lambda}$ za sve najbliže susede isti (idealni kristal!), koeficijent $C_{\alpha\beta}(\vec{\lambda})$ ne zavisi od $\vec{\lambda}$. Tada hamiltonijan (3.6) postaje:

$$H = \sum_{\alpha; \vec{n}} \frac{M}{2} \dot{u}_\alpha^2(\vec{n}) + \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta; \vec{n}, \vec{\lambda}} C_{\alpha\beta} [u_\alpha(\vec{n}) - u_\alpha(\vec{n} \pm \vec{\lambda})] [u_\beta(\vec{n}) - u_\beta(\vec{n} \pm \vec{\lambda})] \tag{3.7}$$

¹Lenard-Džonsov potencijal koji je proporcionalan $Ar^{-6} - Br^{-12}$, najpogodniji je kod fonona u slučaju kovalentnih i molekulskih kristala

Kako je dobijeni hamiltonijan (3.7) kvadratni, može se dijagonalizovati Furijeovom transformacijom:

$$u_\alpha(\vec{n}) = A_\alpha(\vec{k}) e^{i(\vec{k}\vec{n} - \omega t)} \quad (3.8)$$

tj. nalaženjem rešenja u obliku ravnih talasa.

Prelazak u reprezentaciju druge kvantizacije koristi isti oblik hamiltonijana, samo se u izrazu za pomeraje (3.8) prelazi na boze-operatore $b_j^+(\vec{k})$ i $b_j(\vec{k})$ koji kreiraju, odnosno anihiliraju fonone sa energijama $\hbar\omega_j(\vec{k})$. Novi operatori zadovoljavaju sledeće komutacione relacije:

$$[b_i(\vec{k}), b_j^+(\vec{l})] = \delta_{\vec{k}, \vec{l}} \delta_{ij} ; \quad [b_i(\vec{k}), b_j(\vec{l})] = [b_i^+(\vec{k}), b_j^+(\vec{l})] = 0 .$$

Na taj način se kvantnomehanički hamiltonijan, oblika (3.7), može unitarnom transformacijom svesti na hamiltonijan sistema nezavisnih oscilatora tj. dijagonalizovati i naći energija fonona u idealnoj beskonačnoj strukturi. Ona se sastoji u razvoju pomeraja $\vec{u}(\vec{n})$ po ravnim talasima tipa:

$$\vec{u}(\vec{n}) = \sum_{j, \vec{k}} \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_j(\vec{k})}} [b_j^+(\vec{k}) e^{-i(\vec{k}\vec{n} - \omega_j(\vec{k})t)} + h.c.] \vec{l}_j(\vec{k}) , \quad j \in (x, y, z) \quad (3.9)$$

gde je $N = N_x N_y N_z$ - broj atoma (molekula) po elementarnoj ćeliji kristala, a *h.c.* označava sabirak koji je jednak prethodnom - samo ermitski konjugovanom. Vektori $\vec{l}_j(\vec{k})$ su polarizacioni fononski vektori, normirani na sledeći način:

$$\vec{l}_i(\vec{k}) \cdot \vec{l}_j(\vec{k}) = \delta_{ij} , \quad i, j \in (x, y, z)$$

$b_j^+(\vec{k})$ su operatori kreacije fonona sa impulsom \vec{k} . Uvodjenjem boze-amplituda kao koeficijenata u razvoju (3.9), prelazi se na kvantnomehanički tretman oscilatornih pojava u kristalu. Klasičan tretman doveo bi do sličnog rezultata, sa razlikom što se u klasičnom rezultatu ne bi pojavio član $\frac{1}{2} \sum_{j, \vec{k}} \hbar\omega_j(\vec{k})$, koji definiše energiju nultih oscilacija.

Zamenom (3.9) u (3.7) i na osnovu činjenice da su komponente vektora \vec{n} i \vec{k} date sa:

$$|\vec{n}|_\alpha = n_\alpha a_\alpha ; \quad |\vec{k}|_\alpha = \frac{2\pi \nu_\alpha}{N_\alpha a_\alpha} ; \quad -\frac{N_\alpha}{2} \leq (\nu_\alpha, n_\alpha) \leq \frac{N_\alpha}{2}, \quad \alpha \in (x, y, z)$$

gde su n_α i ν_α celi brojevi, N_α - brojevi atoma i a_α - konstante rešetke duž odgovarajućih osa, hamiltonijan (3.7) postaje:

$$H = \sum_{j, \vec{k}} \left[b_j^+(\vec{k}) b_j(\vec{k}) + \frac{1}{2} \right] \hbar\omega_j(\vec{k})$$

Vidi se da je hamiltonijan dat kao suma hamiltonijana nezavisnih oscilatora:

$$H = \sum_{j,\vec{k}} H_{j,\vec{k}} ; \quad H_{j,\vec{k}} = \left[n_j(\vec{k}) + \frac{1}{2} \right] E_j(\vec{k}) ,$$

pri čemu su energije fonona $E_j(\vec{k}) = \hbar\omega_j(\vec{k})$ i operator broja fonona: $n_j(\vec{k}) = b_j^+(\vec{k}) b_j(\vec{k})$.

Iz analize oscilatornog kretanja atoma sledi da su fononi - kvazičestice bozonskog tipa, sa svim odgovarajućim osobinama. Dva sudarena fonona mogu nestati zajedno, a novi nastaje sa energijom jednakom zbiru energija sudarenih fonona. Dakle, fononi su osnovna pobudjenja kristala i javljaju se, usled oscilatornog kretanja atoma oko ravnotežnih položaja, kao specifičan gas kvazičestica nelokalizovan za određeni atom iz kristala, već kao karakteristika celog kristala.

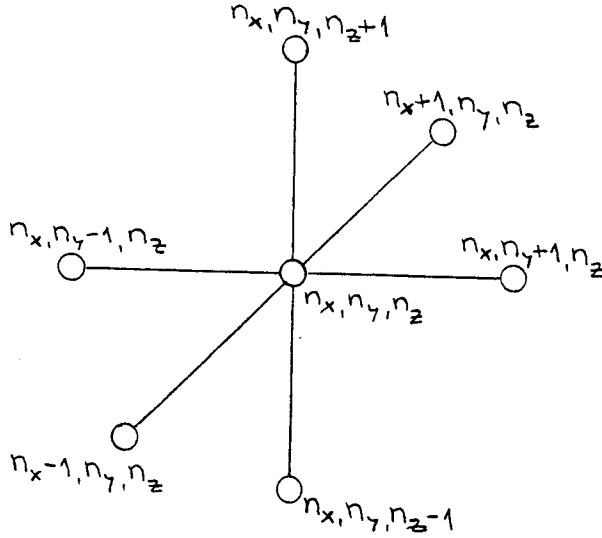
Mada u prirodi nema čistih izotropnih kristala, niti se oni mogu na današnjem nivou tehnologije proizvesti, izučavanje idealnih (beskonačnih) struktura, korisno je zbog toga što se za osnovne fizičke fenomene mogu izračunati njihove globalne karakteristike i dobiti ono što se obično naziva - kvalitativna slika, a zaključci dobijeni na taj način kao i metodologija istraživanja, mogu se u principu prenositi na neidealne strukture, a pre svega na kristalne strukture sa narušenom translacionom simetrijom.

Idealne beskonačne strukture su kristali sa osobinom translacione invarijantnosti u tri uzajamno nekomplanarna pravca. Ovi pravci, koji se uvode u kristalografskoj, ne moraju biti uzajamno ortogonalni, pa se zato obično u teorijskoj fizici kondenzovane materije uvodi dodatni, Dekartov sistem. Mi ćemo posmatrati samo kubni kristal kada su kristalografski uvedeni pravci uzajamno ortogonalni i ovih problema nema.

S obzirom na to, hamiltonijan sistema u aproksimaciji najbližih suseda (3.7) može da se napiše u obliku:

$$H = \sum_{\alpha;\vec{n}} \frac{p_{\alpha;\vec{n}}^2}{2M} + \frac{1}{4} \sum_{\alpha;\vec{n},\vec{\lambda}} C_{\vec{n},\vec{\lambda}}^{\alpha\alpha} \left(u_{\alpha;\vec{n}} - u_{\alpha;\vec{n}\pm\vec{\lambda}} \right)^2 \quad (3.10)$$

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



Slika 3.2

Da bi se shvatio početak primene matematičkog formalizma, priložena je slika 3.2, koja analitički prikazuje \vec{n} -ti atom kristala u okruženju svojih najbližih suseda.

Vidi se da $|\vec{\lambda}|/a$ može jedino da uzme vrednosti: -1 i 1.

U skladu sa svim ovim, izraz za fononski hamiltonijan (3.10) može da se napiše u pogodnijoj (razvijenoj) formi:

$$H = T + V_{eff} \quad (3.11)$$

pri čemu su:

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

$$\begin{aligned} V_{eff} = & \sum_{\alpha; n_x, n_y, n_z} \frac{C^{\alpha\alpha}}{4} \left[\left(u_{\alpha; n_x+1, n_y, n_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z} \right)^2 + \left(u_{\alpha; n_x-1, n_y, n_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z} \right)^2 + \right. \\ & + \left(u_{\alpha; n_x, n_y+1, n_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z} \right)^2 + \left(u_{\alpha; n_x, n_y-1, n_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z} \right)^2 + \quad (3.12) \\ & \left. + \left(u_{\alpha; n_x, n_y, n_z+1} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z} \right)^2 + \left(u_{\alpha; n_x, n_y, n_z-1} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z} \right)^2 \right] \end{aligned}$$

Zakon disperzije fonona biće potražen metodom Grinovih funkcija opisanim u prethodnom poglavlju. U tu svrhu posmatra se dvovremenska temperaturska Grinova funkcija:

$$G_{\vec{n}, \vec{m}}^{\alpha\alpha}(t - t') \equiv \langle \langle u_{\alpha; \vec{n}}(t) \mid u_{\alpha; \vec{m}}(t') \rangle \rangle = \Theta(t - t') \langle [u_{\alpha; \vec{n}}(t), u_{\alpha; \vec{m}}(t')] \rangle_0 \quad (3.13)$$

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

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

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

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

koja je zadovoljena za:

$$-M\omega^2 G_{\vec{n},\vec{m}}^{\alpha\alpha}(\omega) = -\frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{\vec{n},\vec{m}} + \frac{1}{i\hbar} \langle\langle [p_{\alpha;\vec{n}}, H] \mid u_{\alpha;\vec{m}} \rangle\rangle_{\omega} \quad (3.14)$$

Dalji postupak odredjivanja Grinovih funkcija $G_{\vec{n},\vec{m}}^{\alpha\alpha}(\omega)$, zahteva izračunavanje komutatora koji figurišu u višim Grinovim funkcijama $\langle\langle \dots \rangle\rangle$ 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\alpha}}{4} \times \\ &\times \left\{ 2 \left[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}) \right] (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x+1,n_y,n_z}) + \right. \\ &+ 2 \left[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}) \right] (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x-1,n_y,n_z}) + \\ &+ 2 \left[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}) \right] (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y+1,n_z}) + \\ &+ 2 \left[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}) \right] (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y-1,n_z}) + \\ &+ 2 \left[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}) \right] (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,n_z+1}) + \\ &+ 2 \left[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}) \right] (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\alpha}}{2} \delta_{\alpha\beta} \left[(\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}) + \right. \\ &+ (\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}) \] = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= -i\hbar \frac{C^{\beta\beta}}{2} \left(u_{\beta;m_x,m_y,m_z} - u_{\beta;m_x+1,m_y,m_z} - u_{\beta;m_x-1,m_y,m_z} + u_{\beta;m_x,m_y,m_z} + \right. \\
 &\quad + u_{\beta;m_x,m_y,m_z} - u_{\beta;m_x-1,m_y,m_z} - u_{\beta;m_x+1,m_y,m_z} + u_{\beta;m_x,m_y,m_z} + u_{\beta;m_x,m_y,m_z} - \\
 &\quad - u_{\beta;m_x,m_y+1,m_z} - u_{\beta;m_x,m_y-1,m_z} + u_{\beta;m_x,m_y,m_z} + u_{\beta;m_x,m_y,m_z} - u_{\beta;m_x,m_y+1,m_z} - \\
 &\quad - u_{\beta;m_x,m_y-1,m_z} + u_{\beta;m_x,m_y,m_z} + u_{\beta;m_x,m_y,m_z} - u_{\beta;m_x,m_y,m_z+1} - u_{\beta;m_x,m_y,m_z-1} + \\
 &\quad \left. + u_{\beta;m_x,m_y,m_z} + u_{\beta;m_x,m_y,m_z} - u_{\beta;m_x,m_y,m_z+1} - u_{\beta;m_x,m_y,m_z-1} + u_{\beta;m_x,m_y,m_z} \right) = \\
 &= -i\hbar C^{\beta\beta} \left(6u_{\beta;m_x,m_y,m_z} - u_{\beta;m_x+1,m_y,m_z} - u_{\beta;m_x-1,m_y,m_z} - \right. \\
 &\quad \left. - u_{\beta;m_x,m_y+1,m_z} - u_{\beta;m_x,m_y-1,m_z} - u_{\beta;m_x,m_y,m_z+1} - u_{\beta;m_x,m_y,m_z-1} \right)
 \end{aligned}$$

Ovde su iskorišćene komutacione relacije za pomeraje i impulse:

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

kao i definicija Kroneckerovog simbola

$$\delta_{r,s} = \begin{cases} 1 & \text{za } r = s \\ 0 & \text{za } r \neq s \end{cases}$$

Uzimajući u obzir

$$G_{\vec{n}, \vec{m}}^{\alpha\alpha} \equiv G_{n_x, n_y, n_z; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha} = \langle \langle u_{\alpha; n_x, n_y, n_z} | u_{\alpha; m_x, m_y, m_z} \rangle \rangle \quad (3.15)$$

i zamenom nadjenih komutatora u jednačinu (3.14) sledi:

$$\begin{aligned}
 -M\omega^2 G_{n_x, n_y, n_z; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha} &= -\frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{n_x, m_x} \delta_{n_y, m_y} \delta_{n_z, m_z} - C^{\alpha\alpha} \left(6 G_{n_x, n_y, n_z; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha} - \right. \\
 &\quad - G_{n_x+1, n_y, n_z; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha} - G_{n_x-1, n_y, n_z; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha} - G_{n_x, n_y+1, n_z; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha} - \\
 &\quad \left. - G_{n_x, n_y-1, n_z; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha} - G_{n_x, n_y, n_z+1; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha} - G_{n_x, n_y, n_z-1; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha} \right) \quad (3.16)
 \end{aligned}$$

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

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

na jednačinu (3.16), te uzimajući u obzir

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

i nakon neznatnih algebarskih operacija, ona prelazi u:

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

koja je ispunjena ako je:

$$\left[\frac{M\omega^2}{C^{\alpha\alpha}} + 2 (\cos a_x k_x + \cos a_y k_y + \cos a_z k_z - 3) \right] G_{\vec{k}}^{\alpha}(\omega) = \frac{i\hbar}{2\pi C^{\alpha\alpha}} \quad (3.17)$$

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

$$E_{\alpha}(\vec{k}) \equiv \hbar \omega_{\alpha}(\vec{k}) = 2\hbar \Omega_{\alpha} \sqrt{\sin^2 \frac{a_x k_x}{2} + \sin^2 \frac{a_y k_y}{2} + \sin^2 \frac{a_z k_z}{2}} \quad (3.18)$$

gde je $\Omega_{\alpha} = \sqrt{C^{\alpha\alpha}/M}$. U aproksimaciji malih talasnih vektora i obeležavanjem: $a = a_x = a_y = a_z$, $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}$, poslednja relacija se svodi na:

$$E_{\alpha}(\vec{k}) = \hbar \Omega_{\alpha} a k \quad (3.19)$$

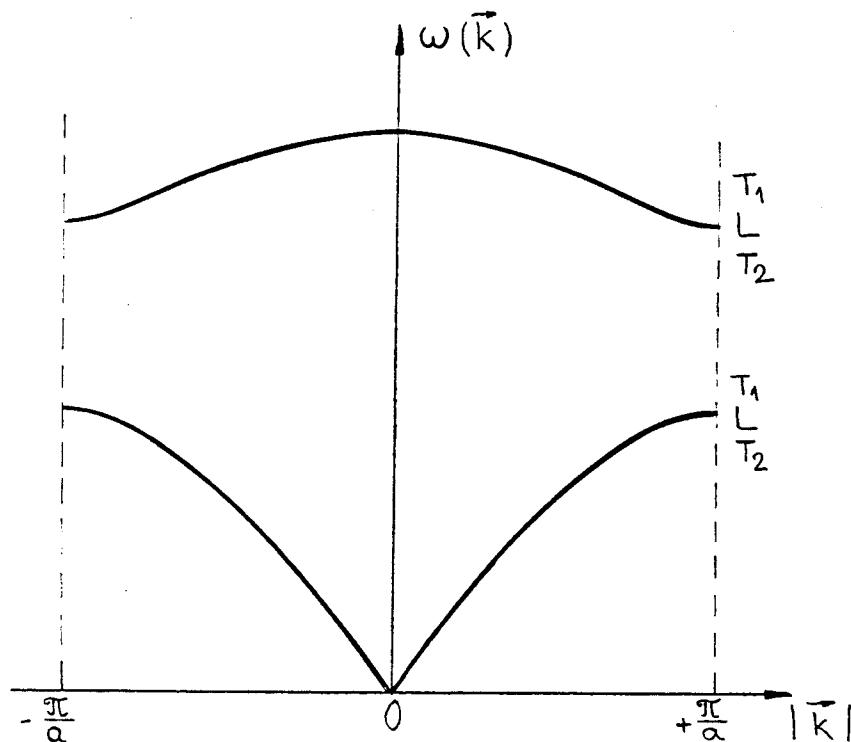
što predstavlja tipičan i poznat izraz za zakon disperzije akustičkih fonona.

Pažljiva razmatranja pokazuju da postoji nekoliko tipova prostiranja talasnih poremećaja u kristalu, koji se razlikuju po kretanju atoma unutar elementarne celije. Svaki tip fonona je karakterisan specifičnom zavisnošću energije od kvaziimpulsa. Kod niza sa tri stepena slobode postoje tri načina oscilovanja: jedno duž pravca niza

i dva uzajamno normalna u ravnima, normalnim 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 okomit je na osu lanca i normalan 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 čelijom sve tri komponente frekvencija mehaničkih talasa $\omega_{\alpha}(k)$ teže ka nuli kada $k \rightarrow 0$. Takvi kvanti mehaničkih pobudjenja sa linearnim zakonom disperzije nazivaju se - **akustičkim fononima**.



Slika 3.3

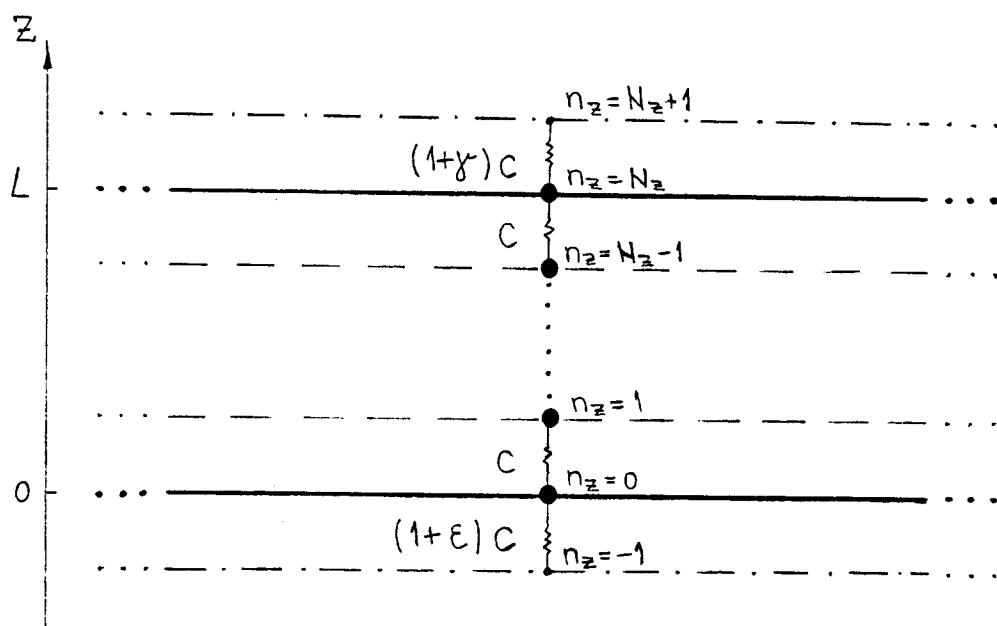
Ako se na sličan način analizira kristal složene strukture sa σ podrešetki po elementarnoj čeliji, onda se za dozvoljene frekvencije dobija 3σ rešenja, od kojih tri frekvencije uvek teže nuli kada $k \rightarrow 0$ i odgovaraju akustičkim fononskim granama, dok za ostale ($3\sigma - 3$) grane važi $\lim_{k \rightarrow 0} \omega(k) \neq 0$, a mehaničke oscilacije sa ovom osobinom nazivaju se - **optičkim fononima** (slika 3.3).

Ova razmatranja se odnose na fononske spektre u okviru jedne elementarne celije. Trodimenzionalni kristal sa N elementarnih celija i σ podređenih etki ima $3N\sigma$ stepeni slobode kretanja. Fononski spektar onda uvek čine 3 akustičke grane i $3N\sigma - 3$ optičkih grana.

Treba 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, koji će ukazati na postojanje odgovarajućeg energetskog gepa, umereno je podvući, da fononi (u narednoj glavi izučavanih) filmova spadaju u akustičke, ali se (s obzirom na to da pokazuju neke od osobina optičkih fonona, konkretno poseduju gep) još nazivaju **akustičkim fononima optičkog tipa**.

4. FONONI U KRISTALNIM FILMOVIMA

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



Slika 4.1

Na slici je dat presek kristalnog uzorka u $X(Y)Z$ ravni.

Smatra se da je:

$$N_{x,y} \sim 10^8 \gg N_z \sim 10 ;$$

$$C_{N_z, N_{z+1}} = C_{N_{z+1}, N_z} = (1 + \gamma)C, \quad C_{-1,0} = C_{0,-1} = (1 + \varepsilon)C; \quad \varepsilon, \gamma \in [-1.0, 1.5]$$

n_z - indeks rešetke duž z -pravca i $n_z \in (0, 1, 2, \dots, N_z)$

Posmatra se idealni ² tanki film kubne kristalne strukture načinjen na supstratu nekim tehničko-tehnološkim postupkom (naparavanjem, spaterovanjem i sl.). Po dimenzijama on je takav da je u XY - ravnima beskonačan, a u z - pravcima ima konačnu debljinu (L). Znači da ovaj film poseduje dve beskonačne granične površine paralelne XY - ravnima i to za $z = 0$ i $z = L$. Pretpostavlja se da je u ovom modelu duž z -ose locirano $N_z + 1$ atoma i da su torzione konstante $C^{\alpha\beta}$ zanemarljive u odnosu na konstante istezanja $C^{\alpha\alpha}$. Parametri elementarne celije posmatranog filma su onda: $a_x = a_y = a_z = a$. Smatra se da atomi, koji pripadaju graničnim slojevima prikazanog tankog filma, interaguju sa spoljašnjom sredinom, bez obzira na to što duž z -pravaca iznad gornje i ispod donje granične površine, nema atoma (motiva, čvorova) Hukovim silama vezanim za atome filma.

U skladu sa napred navedenim uslovima, konstante elastičnosti koje opisuju interakciju atoma graničnih površina sa spoljašnjim sredinama (supstrat i npr. vazduh), modifikovane su odgovarajućim koeficijentima ε i γ .

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

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

ali i:

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

Kada bi bilo: $C_{-1}^{\alpha\alpha} = C_{N_z+1}^{\alpha\alpha} = 0$ ($\varepsilon = \gamma = -1$), tada bi granični atomi za $n_z = 0$ i $n_z = N_z$ bili "zamrznuti", tj. javio bi se efekat "krutih zidova".

Ako bi važilo: $C_{-1}^{\alpha\alpha} = C_{N_z+1}^{\alpha\alpha} = C^{\alpha\alpha}$ ($\varepsilon = \gamma = 0$), bio bi to efekat "slobodnih površina".

S obzirom na definisani model, hamiltonijan fononskog podsistema opisanog filma u aproksimaciji najbližih suseda ima isti oblik kao i kod neograničenih kristala (izraz (3.11)):

²idealni - u smislu nenarušenja kristalne strukture (bez prisustva defekata, primesa i sl.), a ne u smislu prostorne neograničenosti

$$H = T + V_{eff} ; \quad T = \sum_{\alpha; \vec{n}} \frac{p_{\alpha; \vec{n}}^2}{2M} \quad (4.1)$$

ali ga je, zbog postojanja graničnih slojeva, zgodno napisati u razdvojenom vidu:

$$H = H_P + H_Z \equiv T + V_{eff}^P + V_{eff}^Z . \quad (4.2)$$

Površinski potencijal interakcije dat je u obliku:

$$\begin{aligned} V_{eff}^P &= \sum_{\alpha; n_x, n_y} \frac{C^{\alpha\alpha}}{4} \left[2 (1 + \varepsilon) (u_{\alpha; n_x, n_y, 0})^2 + 2 (1 + \gamma) (u_{\alpha; n_x, n_y, N_z})^2 + \right. \\ &+ 2 (u_{\alpha; n_x, n_y, 1} - u_{\alpha; n_x, n_y, 0})^2 + 2 (u_{\alpha; n_x, n_y, N_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, N_z-1})^2 + \\ &+ (u_{\alpha; n_x+1, n_y, 0} - u_{\alpha; n_x, n_y, 0})^2 + (u_{\alpha; n_x-1, n_y, 0} - u_{\alpha; n_x, n_y, 0})^2 + \\ &+ (u_{\alpha; n_x, n_y+1, 0} - u_{\alpha; n_x, n_y, 0})^2 + (u_{\alpha; n_x, n_y-1, 0} - u_{\alpha; n_x, n_y, 0})^2 + \\ &+ (u_{\alpha; n_x+1, n_y, N_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, N_z})^2 + (u_{\alpha; n_x-1, n_y, N_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, N_z})^2 + \\ &\left. + (u_{\alpha; n_x, n_y+1, N_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, N_z})^2 + (u_{\alpha; n_x, n_y-1, N_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, N_z})^2 \right] \end{aligned} \quad (4.3)$$

Zapreminske potencijale interakcije dat je u obliku:

$$\begin{aligned} V_{eff}^Z &= \sum_{\alpha; n_x, n_y} \frac{C^{\alpha\alpha}}{4} \times \\ &\times \left\{ \sum_{n_z=1}^{N_z-1} \left[(u_{\alpha; n_x+1, n_y, n_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z})^2 + (u_{\alpha; n_x-1, n_y, n_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z})^2 + \right. \right. \\ &+ (u_{\alpha; n_x, n_y+1, n_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z})^2 + (u_{\alpha; n_x, n_y-1, n_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z})^2 \left. \right] + \\ &+ \left. \sum_{n_z=1}^{N_z-2} (u_{\alpha; n_x, n_y, n_z+1} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z})^2 + \sum_{n_z=2}^{N_z-1} (u_{\alpha; n_x, n_y, n_z-1} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z})^2 \right\} \end{aligned} \quad (4.4)$$

Zakon disperzije fonona i u ovom slučaju biće potražen, kao i u prethodnoj glavi, metodom Grinovih funkcija tražeći Grinovu funkciju istog oblika kao i (3.13) pomoću jednačine (3.14). 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, kao i ostale neophodne osnovne definicije, izračunavaju se potrebni komutatori impulsa i hamiltonijana.

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

$$\begin{aligned} [p_{\beta;m_x,m_y,0}, H] &= [p_{\beta;m_x,m_y,0}, T] + [p_{\beta;m_x,m_y,0}, V_{eff}^Z] + [p_{\beta;m_x,m_y,0}, V_{eff}^P] \equiv \\ &\equiv [p_{\beta;m_x,m_y,0}, V_{eff}^P] = -i\hbar C^{\beta\beta} [(6 + \varepsilon) u_{\beta;m_x,m_y,0} - \\ &- u_{\beta;m_x,m_y,1} - u_{\beta;m_x+1,m_y,0} - \\ &- u_{\beta;m_x-1,m_y,0} - u_{\beta;m_x,m_y+1,0} - u_{\beta;m_x,m_y-1,0}] \end{aligned} \quad (4.5)$$

Za $1 \leq n_z \leq N_z - 1$, na isti način dobija se:

$$\begin{aligned} [p_{\beta;m_x,m_y,m_z}, H] &= [p_{\beta;m_x,m_y,m_z}, T] + [p_{\beta;m_x,m_y,m_z}, V_{eff}^Z] + [p_{\beta;m_x,m_y,m_z}, V_{eff}^P] \equiv \\ &\equiv [p_{\beta;m_x,m_y,m_z}, V_{eff}^Z] = -i\hbar C^{\beta\beta} (6 u_{\beta;m_x,m_y,m_z} - \\ &- u_{\beta;m_x+1,m_y,m_z} - u_{\beta;m_x-1,m_y,m_z} - u_{\beta;m_x,m_y+1,m_z} - \\ &- u_{\beta;m_x,m_y-1,m_z} - u_{\beta;m_x,m_y,m_z+1} - u_{\beta;m_x,m_y,m_z-1}) \end{aligned} \quad (4.6)$$

Konačno, za $n_z = N_z$ potpuno istim postupkom sledi:

$$\begin{aligned} [p_{\beta;m_x,m_y,N_z}, H] &= [p_{\beta;m_x,m_y,N_z}, T] + [p_{\beta;m_x,m_y,N_z}, V_{eff}^Z] + [p_{\beta;m_x,m_y,N_z}, V_{eff}^P] \equiv \\ &\equiv [p_{\beta;m_x,m_y,N_z}, V_{eff}^P] = -i\hbar C^{\beta\beta} [(6 + \gamma) u_{\beta;m_x,m_y,N_z} - \\ &- u_{\beta;m_x,m_y,N_z-1} - u_{\beta;m_x+1,m_y,N_z} - \\ &- u_{\beta;m_x-1,m_y,N_z} - u_{\beta;m_x,m_y+1,N_z} - u_{\beta;m_x,m_y-1,N_z}] \end{aligned} \quad (4.7)$$

Zamenom nadjenih komutatora u jednačinu (3.14) i preimenovanjem $\beta \rightarrow \alpha$; $m \rightarrow n$, dobija se:

- za $n_z = 0$

$$\begin{aligned} -M\omega^2 G_{n_x,n_y,0;m_x,m_y,m_z}^{\alpha\alpha} &= -\frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{n_x,m_x} \delta_{n_y,m_y} \delta_{0,m_z} - \\ &- C^{\alpha\alpha} [(6 + \varepsilon) G_{n_x,n_y,0;m_x,m_y,m_z}^{\alpha\alpha} - G_{n_x,n_y,1;m_x,m_y,m_z}^{\alpha\alpha} - G_{n_x+1,n_y,0;m_x,m_y,m_z}^{\alpha\alpha} - \\ &- G_{n_x-1,n_y,0;m_x,m_y,m_z}^{\alpha\alpha} - G_{n_x,n_y+1,0;m_x,m_y,m_z}^{\alpha\alpha} - G_{n_x,n_y-1,0;m_x,m_y,m_z}^{\alpha\alpha}] \end{aligned} \quad (4.8)$$

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

$$\begin{aligned}
 -M\omega^2 G_{n_x, n_y, n_z; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha} = & -\frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{n_x, m_x} \delta_{n_y, m_y} \delta_{n_z, m_z} - \\
 & - C^{\alpha\alpha} \left(6 G_{n_x, n_y, n_z; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha} - G_{n_x+1, n_y, n_z; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha} - \right. \\
 & \left. - G_{n_x-1, n_y, n_z; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha} - G_{n_x, n_y+1, n_z; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha} - G_{n_x, n_y-1, n_z; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha} - \right. \\
 & \left. - G_{n_x, n_y, n_z+1; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha} - G_{n_x, n_y, n_z-1; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha} \right) \quad (4.9)
 \end{aligned}$$

- za $n_z = N_z$

$$\begin{aligned}
 -M\omega^2 G_{n_x, n_y, N_z; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha} = & -\frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{n_x, m_x} \delta_{n_y, m_y} \delta_{N_z, m_z} - \\
 & - C^{\alpha\alpha} \left[(6 + \gamma) G_{n_x, n_y, N_z; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha} - G_{n_x, n_y, N_z-1; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha} - G_{n_x+1, n_y, N_z; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha} - \right. \\
 & \left. - G_{n_x-1, n_y, N_z; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha} - G_{n_x, n_y+1, N_z; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha} - G_{n_x, n_y-1, N_z; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha} \right] \quad (4.10)
 \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned}
 G_{n_x, n_y, n_z; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha} & \equiv G_{n_x, n_y, n_z; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha}(\omega) = \\
 & = \frac{1}{N} \sum_{k_x, k_y} e^{-ia[(n_x - m_x)k_x + (n_y - m_y)k_y]} G_{n_x m_z}^{\alpha}(k_x, k_y; \omega)
 \end{aligned}$$

na sistem jednačina (4.8 - 10), 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 jednačina:

$$\begin{aligned}
 (\varrho_k^\alpha - \varepsilon) G_{0, m_z}^\alpha + G_{1, m_z}^\alpha &= \mathcal{K} \delta_{0, m_z} \\
 G_{0, m_z}^\alpha + \varrho_k^\alpha G_{1, m_z}^\alpha + G_{2, m_z}^\alpha &= \mathcal{K} \delta_{1, m_z} \\
 G_{1, m_z}^\alpha + \varrho_k^\alpha G_{2, m_z}^\alpha + G_{3, m_z}^\alpha &= \mathcal{K} \delta_{2, m_z} \\
 &\vdots \quad \vdots \quad \vdots \quad \vdots \quad \vdots \quad \vdots \quad \vdots \\
 &\vdots \quad \vdots \quad \vdots \quad \vdots \quad \vdots \quad \vdots \quad \vdots \\
 &\vdots \quad \vdots \quad \vdots \quad \vdots \quad \vdots \quad \vdots \quad \vdots \\
 G_{n_z-1, m_z}^\alpha + \varrho_k^\alpha G_{n_z, m_z}^\alpha + G_{n_z+1, m_z}^\alpha &= \mathcal{K} \delta_{n_z, m_z} \tag{4.11} \\
 &\vdots \quad \vdots \quad \vdots \quad \vdots \quad \vdots \quad \vdots \quad \vdots \\
 &\vdots \quad \vdots \quad \vdots \quad \vdots \quad \vdots \quad \vdots \quad \vdots \\
 G_{N_z-3, m_z}^\alpha + \varrho_k^\alpha G_{N_z-2, m_z}^\alpha + G_{N_z-1, m_z}^\alpha &= \mathcal{K} \delta_{N_z-2, m_z} \\
 G_{N_z-2, m_z}^\alpha + \varrho_k^\alpha G_{N_z-1, m_z}^\alpha + G_{N_z, m_z}^\alpha &= \mathcal{K} \delta_{N_z-1, m_z} \\
 G_{N_z-1, m_z}^\alpha + (\varrho_k^\alpha - \gamma) G_{N_z, m_z}^\alpha &= \mathcal{K} \delta_{N_z, m_z}
 \end{aligned}$$

gde je:

$$\begin{aligned}
 \varrho_k^\alpha &= \frac{\omega^2}{\Omega_\alpha^2} - 4 \sin^2 \frac{ak_x}{2} - 4 \sin^2 \frac{ak_y}{2} - 2 \equiv \varrho \\
 \text{a} \quad \mathcal{K} &= \frac{i\hbar}{2\pi C^{\alpha\alpha}} \quad k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}
 \end{aligned} \tag{4.12}$$

Ovaj sistem nehomogenih algebarskih i diferencnih jednačina (ima ih $N_z + 1$ -na) po traženim Grinovim funkcijama $G_{n_z, m_z}^\alpha(\omega)$ ima rešenja u obliku razlomka čiji je imenilac determinanta tog sistema.

$$\mathcal{D}_{N_z+1}(\varrho) = \left| \begin{array}{ccccccccc} \varrho - \varepsilon & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & \varrho & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \varrho & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & & \ddots & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & \varrho & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & \varrho & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & \varrho - \gamma \end{array} \right|_{N_z+1} \tag{4.13}$$

Trivijalnim postupkom, gornja determinanta se može razviti i izraziti preko polinoma Čebiševa (pogledati Dodatak):

$$\begin{aligned}\mathcal{D}_{N_z+1}(\varrho) &= (\varrho - \varepsilon)(\varrho - \gamma) \mathcal{C}_{N_z-1}(\varrho) - \\ &- (2\varrho - \varepsilon - \gamma) \mathcal{C}_{N_z-2}(\varrho) + \mathcal{C}_{N_z-3}(\varrho)\end{aligned}\quad (4.14)$$

U skladu sa osnovnim zadatkom ovog istraživanja, a to je određivanje fononskih energija, i na osnovu osobina Grinovih funkcija, potrebno je da se odredite polovi traženih Grinovih funkcija. Jasno je da se ovo svodi na određivanje korena (nula) determinante (4.13). Dakle, potrebno je rešiti uslov:

$$\mathcal{D}_{N_z+1}(\varrho) \equiv 0 \quad (4.15)$$

Ovaj zadatak u opštem slučaju nije analitički rešiv (može se rešiti numerički za zadate parametre: ε , γ i N_z), a u nastavku će biti proanalizirana dva specijalna slučaja.

1° Slobodne površine

U tom slučaju je:

$$\varepsilon = \gamma = 0 \quad (4.16)$$

Tada se izraz (4.14) svodi na:

$$\mathcal{D}_{N_z+1}(\varrho) = \varrho^2 \mathcal{C}_{N_z-1}(\varrho) - 2\varrho \mathcal{C}_{N_z-2}(\varrho) + \mathcal{C}_{N_z-3}(\varrho) \quad (4.17)$$

Uzimajući u obzir rekurentnu relaciju za polinome Čebiševa (7.2), te stavljajući: prvo $n = N_z - 1$, a potom $n = N_z - 2$, izraz (4.17) se svodi na:

$$\mathcal{D}_{N_z+1}(\varrho) = \varrho \mathcal{C}_{N_z}(\varrho) - \mathcal{C}_{N_z-1}(\varrho) \quad (4.18)$$

Iz (7.2) zamenjujući da je $n = N_z$, dobija se:

$$\mathcal{C}_{N_z+1}(\varrho) = \varrho \mathcal{C}_{N_z}(\varrho) - \mathcal{C}_{N_z-1}(\varrho) \quad (4.19)$$

odnosno, uporedjujući to sa (4.18):

$$\mathcal{D}_{N_z+1}(\varrho) = \mathcal{C}_{N_z+1}(\varrho) \quad (4.20)$$

Ovim je pokazana korelacija izmedju sistema jednačina (4.11), odnosno odgovarajuće determinante tog sistema (4.13) i polinoma Čebiševa. Iz uslova (4.15) slede nule Čebiševljevih polinoma (videti Dodatak), a uzimajući u obzir i izraz (4.12), jednostavnim algebarskim operacijama (uz smenu: $\mu = N_z + 2 - \nu$, što

povlači $\omega_\nu(\vec{k}) \rightarrow \omega_\mu(\vec{k})$, dolazi se do izraza koji daje zakon disperzija fonona u tankom (strukturno nedeformisanom) filmu:

$$E_\alpha(\vec{k}_\mu) = \hbar \omega_\alpha(\vec{k}_\mu) = 2 E_0 \sqrt{\sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y}{2} + \sin^2 \frac{ak_z(\mu)}{2}} \quad (4.21)$$

gde je $E_0 = \hbar \Omega_\alpha$.

Gornji izraz za moguće energije fonona, po obliku je isti kao izraz (3.18) dobijen za idealne neograničene strukture, s razlikom što je tamo k_z kontinualno promenljivo (u intervalu $[0, \pi/a]$) kao što su k_x i k_y , a ovde je

$$k_z(\mu) = \frac{\pi}{a} \frac{\mu}{N_z + 2}; \quad \mu = 1, 2, 3, \dots, N_z + 1 \quad (4.22)$$

diskretno promenljivo. Pored toga, uočava se da je:

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

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

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

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

Uporedjujući dobijene rezultate sa odgovarajućim, dobijenim za idealne beskonačne strukture, može se zaključiti da sve tri akustičke frekvencije u masivnim strukturama teže nuli kada k teži nuli, dok su minimalne frekvencije u tankom filmu date kao:

$$\omega_\alpha^{min}(k_{min}) \equiv \omega_\alpha^{min}(k_x = k_y = 0, k_z = k_z^{min}) = 2 \Omega_\alpha \sin \left[\frac{\pi}{2(N_z + 2)} \right] \neq 0. \quad (4.23)$$

To znači da fononi u tankim filmovima poseduju ("donji") energetski gap

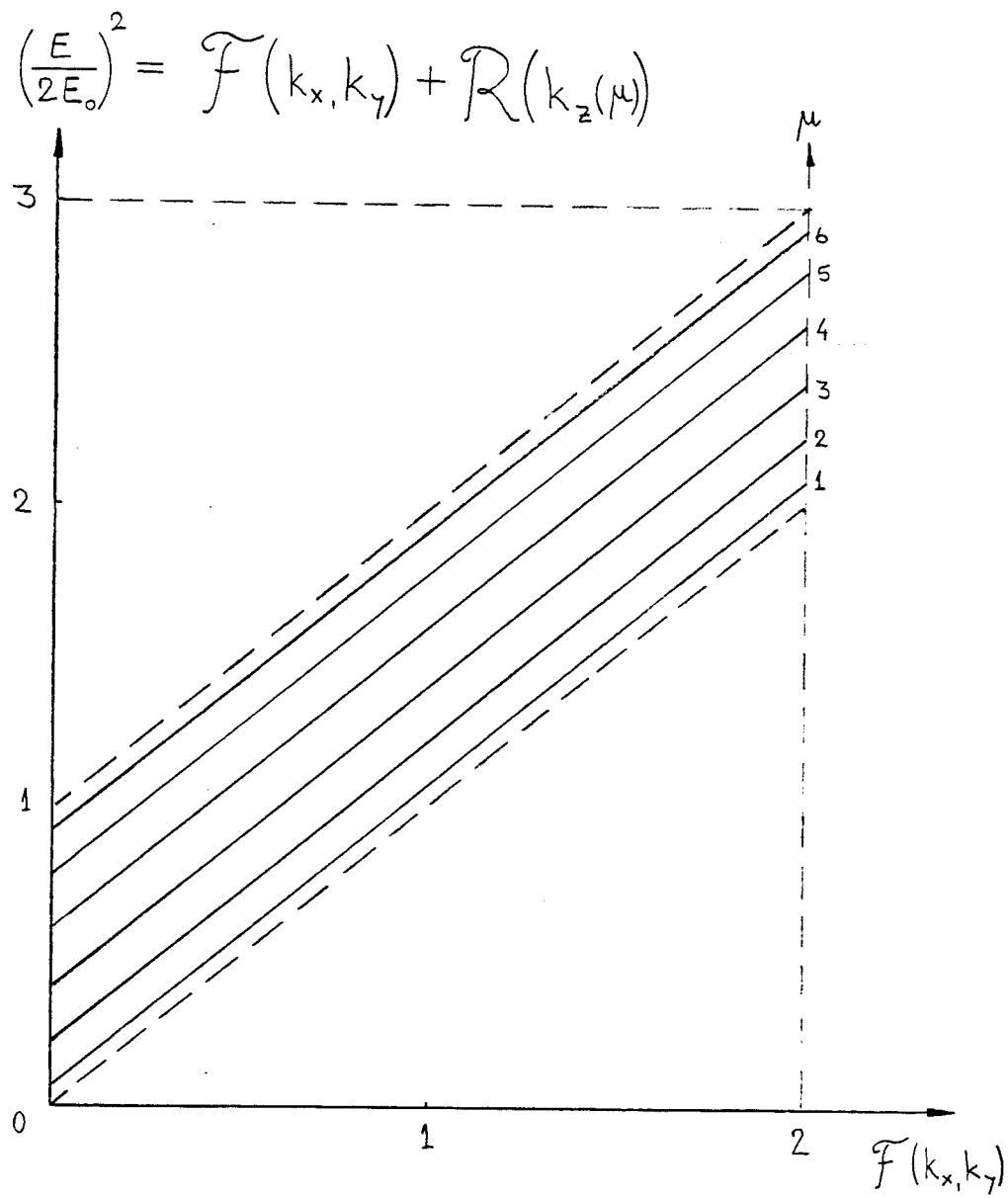
$$\begin{aligned} \Delta_{min} &= \hbar \omega_\alpha^{min} = E_f^{min} - E_\infty^{min} = \\ &= 2 E_0 \sin \left[\frac{\pi}{2(N_z + 2)} \right] \end{aligned} \quad (4.24)$$

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

Na osnovu (4.24) može se odrediti aktivaciona temperatura fonona u filmu:

$$T_{ac} = \frac{\Delta_{min}}{k_B} = \frac{2\hbar}{k_B} \Omega_\alpha \sin \left[\frac{\pi}{2(N_z + 2)} \right] \quad (4.25)$$

tj. temperatura neophodna za ekscitaciju fonona, koja ima konačnu pozitivnu vrednost.



Slika 4.2

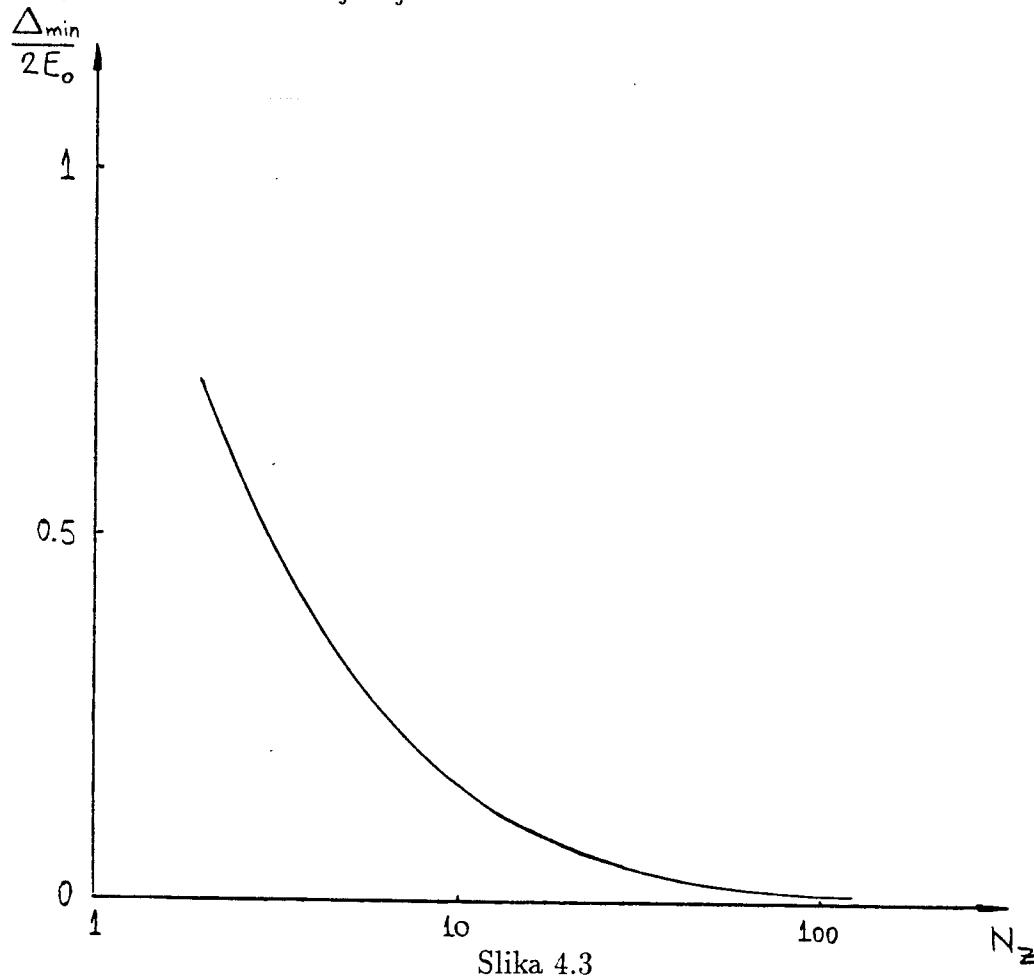
Uočljivo je da postoji i "gornji" energetski gep:

$$\begin{aligned}\Delta_{max} &= \hbar \omega_{\alpha}^{max} = E_{\infty}^{max} - E_f^{max} = \\ &= 2 E_0 \left[\sqrt{3} - \sqrt{2 + \sin^2 \left(\frac{\pi}{2} \frac{N_z + 1}{N_z + 2} \right)} \right]\end{aligned}\quad (4.26)$$

Na slici 4.2 prikazani su fononski spektri:

- 1) za idealne beskonačne strukture (isprekidanim linijama, izmedju kojih je on kontinualan);
- 2) za tanki film (konkretno $N_z = 5$, punim linijama - on je diskretan).

Primetni su gepovi i energetska diskretnost (za film), zatim E_f^{min} , E_f^{max} i još $N_z - 1$ -a dozvoljena vrednost izmedju njih.



Slika 4.3

Takodje, vidi se da je aktivaciona temperatura ($T_{ac} \sim E_f^{min}$) funkcija N_z , što je prikazano na slici 4.3.

Iz izraza (4.25) i na osnovu slike 4.3 se vidi da aktivaciona temperatura opada sa povećanjem debljine filma, tj. sa porastom N_z . Za izuzetno tanke filmove T_{ac} je relativno visoka. Na osnovu ove činjenice viša superprovodna kritična temperatura (temperatura iznad koje materijal ne poseduje superprovodne osobine) u filmovima, mogla bi biti objašnjena time da se do T_{ac} film ponaša kao "zamrznuta" struktura, tj. da fononi nisu realno prisutni (nema mehaničkih vibracija koje bi stvarale otpor električnoj struji), pa bi se elektroni, ukoliko ih ima, sve do ovih temperatura, u tankoj strukturi mogli kretati bez trenja, tj. bezotporno (pojava poznata kao idealna električna provodnost).

2^o Kruti zidovi

U ovom slučaju je:

$$\varepsilon = \gamma = -1 \quad (4.27)$$

Tada se izraz (4.14) svodi na:

$$\mathcal{D}_{N_z+1}(\varrho) = (\varrho + 1)^2 \mathcal{C}_{N_z-1}(\varrho) - (2\varrho + 2) \mathcal{C}_{N_z-2}(\varrho) + \mathcal{C}_{N_z-3}(\varrho) \quad (4.28)$$

Na osnovu rekurentne relacije za polinome Čebiševa (7.2), te sličnim postupkom svodjenja kao u slučaju slobodnih površina gornji izraz se svodi na:

$$\mathcal{D}_{N_z+1}(\varrho) = (\varrho + 2) \mathcal{C}_{N_z}(\varrho) \quad (4.29)$$

Korišćenjem uslova (4.15) dobijaju se nule ovog polinoma u obliku:

$$\mathcal{C}_{N_z}(\varrho_\nu) = 0 ; \quad \nu = 1, 2, 3, \dots, N_z \quad (4.30)$$

(videti Dodatak) i

$$\varrho = -2 \quad (4.31)$$

što ukupno daje $N_z + 1$ -u zahtevanu vrednost.

Jednakost (4.31), s obzirom na (4.12), dovodi do jednog rešenja:

$$\omega_0 \equiv \omega_\alpha(k_x, k_y, 0) = 2 \Omega_\alpha \sqrt{\sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y}{2}} \quad (4.32)$$

Pošto ova frekvencija ne zavisi od k_z , jasno je da su:

$$\Delta_{min}^{(0)} = 0 ; \quad \Delta_{max}^{(0)} = 2 E_0 \left(\sqrt{3} - \sqrt{2} \right) \quad (4.33)$$

Ovo rešenje nema fizičkog smisla zato što ne zadovoljava osnovne kvantno-mehaničke postavke ³.

Zbog toga se ovo rešenje odbacuje, a analiza svodi na preostalih N_z . Iz (4.30), uz (4.12), gotovo istovetnim postupkom svodjenja i sredjivanja jednačina, kao u prethodno detaljno elaboriranom slučaju (film sa slobodnim površinama), dolazi se do zakona disperzija fonona:

$$E_\alpha(\vec{k}_\mu) = \hbar \omega_\alpha(\vec{k}_\mu) = 2 E_0 \sqrt{\sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y}{2} + \sin^2 \frac{ak_z(\mu)}{2}} \quad (4.34)$$

Ovaj izraz za moguće energije fonona, po obliku je isti kao izraz (3.18) dobijen za idealne neograničene strukture i sličan izrazu (4.21) za film sa slobodnim površinama, s razlikom što je ovde:

$$k_z(\mu) = \frac{\pi}{a} \frac{\mu}{N_z + 1}; \quad \mu = 1, 2, 3, \dots, N_z \quad (4.35)$$

$$k_z^{min} = \frac{\pi}{a} \frac{1}{N_z + 1} > 0$$

$$k_z^{max} = \frac{\pi}{a} \frac{N_z}{N_z + 1} < 1$$

naravno za, $10 \sim N_z \ll N_{x,y} \sim 10^8$.

Između minimalne i maksimalne vrednosti za k_z , pa prema tome i za $E(\vec{k})$, postoji još $N_z - 2$ -e diskretne vrednosti.

To znači da fononi i u tankim filmovima sa krutim zidovima poseduju energetske geopolove:

$$\Delta_{min} = 2 E_0 \sin \left[\frac{\pi}{2(N_z + 1)} \right] \quad (4.36)$$

$$\Delta_{max} = 2 E_0 \left[\sqrt{3} - \sqrt{2 + \sin^2 \left(\frac{\pi}{2} \frac{N_z}{N_z + 1} \right)} \right] \quad (4.37)$$

³Svaka mikročestica zatvorena u ograničeni deo prostora ima diskretne energetske nivoe i nullu - energiju osnovnog stanja, različitu od nule; to je poznata "boks-kvantizacija" i u skladu je sa jednim od osnovnih principa - Hajzenbergovom relacijom neodredjenosti

Analizom ovih izraza i poredjenjem sa istim za filmove sa slobodnim površinama, može se zaključiti da su efekti, koji su posledica postojanja konačne debljine posmatranog kristalnog sistema (filma sa krutim zidovima), nešto izraženiji kod "donjeg" energetskog gepa, pa prema tome, i kod odgovarajuće aktivacione temperature.

Ovaj zaključak ipak treba uzeti sa rezervom, jer odbacivanje jednog od rešenja (nefizičkog) dovodi u sumnju sve ove "optimističkije" rezultate.

Prema tome i bez obzira na sve "ograđe", ovde sprovedena istraživanja su neosporno pokazala da je prisustvo fononskog gepa i njemu odgovarajuće aktivacione temperature neophodne za pobudjivanje fonona, isključiva posledica postojanja graničnog sistema. Fononska aktivaciona energija (minimalna energija potrebna za njihovo formiranje) ukazuje na moguće objašnjenje eksperimentalne činjenice prema kojoj su tanki filmovi bolji superprovodnici od masivnih uzoraka koji su napravljeni od istog materijala i iste su kristalne strukture.

5. ZAKLJUČAK

Istraživanje fononskih spektara, odabranim metodom Grinovih funkcija, u neograničenim i film-strukturama, dovelo je do sledećih bitnih zaključaka.

1. Sve tri akustičke frekvencije u masivnim strukturama teže nuli, kada $\vec{k} \rightarrow 0$, dok u tankom filmu teže nekoj minimalnoj vrednosti koja zavisi od debljine filma.
2. Fononski spektri u tankim strukturama poseduju energetski gep, koji je isključiva posledica prisustva granica sistema.
3. Postojanje minimalne energije potrebne za pobuđivanje fonona u film-strukturama i njoj odgovarajuće aktivacione temperature T_{ac} , upućuje na zaključak da se sistem do T_{ac} ponaša kao "zamrznut", tj. fononi nisu realno prisutni (nema mehaničkih vibracija koje bi stvarale otpor električnoj struji). To ukazuje na moguće objašnjenje eksperimentalne činjenice prema kojoj su tanki filmovi bolji superprovodnici od odgovarajućih masivnih uzoraka.

Svi ovi zaključci su kvalitativne prirode, vezani su za promenu fononskih stanja, odnosno spektara, pod uticajem prisustva granica strukture, kao i za mogući uticaj tih promena na fizičke karakteristike sistema. Zbog toga što su uračunati samo fononski uticaji, ne mogu se smatrati konačnim.

Nastavak istraživanja treba da ispita uticaj granica na spekture i stanja drugih elementarnih pobudjenja i nosilaca nanelektrisanja i na njihovu medjusobnu interakciju u prisustvu izmenjenog fononskog polja. Na osnovu takvih rezultata moći će nešto konkretnije da se kaže o fizičkim veličinama koje determinišu superprovodne karakteristike film - struktura.

Umesno je naglasiti, da ovo istraživanje, u širem smislu shvaćeno, jeste nešto "živo", niti su svi prepostavljeni modeli definitivni i nepromenljivi, niti su konačni odgovori lako dokučivi. Pred istraživačima je, u tom smislu, težak zadatak ali i veliki izazov, jer treba odgonetnuti **prirodu** samu, a ona svoje tajne ne otkriva odjednom i svima.

6. DODATAK

Karakteristične determinante oblika:

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

koje odgovaraju različitim vrednostima, $n = 0, 1, 2, \dots, N$ uz prepostavljene početne uslove:

$$\mathcal{C}_0(x) = 1 ; \quad \mathcal{C}_1(x) = x$$

zadovoljavaju sledeću rekurentnu relaciju:

$$\mathcal{C}_{n+1}(x) = x\mathcal{C}_n(x) - \mathcal{C}_{n-1}(x) \quad (6.2)$$

i nazivaju se Čebiševljevim polinomima ⁴.

Uvodeći smenu: $x = 2 \cos \varphi$ determinanta (7.1) može se analitički izraziti

$$\mathcal{C}_n(x) \longrightarrow \mathcal{C}_n(\varphi) = \frac{\sin[(n+1)\varphi]}{\sin(\varphi)} ; \quad \varphi \neq 0 \quad (6.3)$$

Nule Čebiševljevih polinoma, koje slede iz uslova:

$$\mathcal{C}_n(\varphi) \equiv 0 \quad (6.4)$$

date su relacijom

$$\varphi_\nu = \frac{\pi}{n+1} \nu ; \quad \nu = 1, 2, 3, \dots, n . \quad (6.5)$$

⁴koja predstavlja homogenu diferencnu jednačinu drugog reda sa konstantnim koeficijentima

7. LITERATURA

- [1] B.S.Tošić, *Statistička fizika* , PMF IF, Novi Sad 1978.
- [2] A.S.Davydov, *Teoriya tverdogo tela*, Nauka, Moskva 1976.
- [3] L.I.Šif, *Kvantna mehanika*, V.Karadžić, Beograd 1968.
- [4] Č.Kitel, *Uvod u fiziku čvrstog stanja*, Sav.Admin. Beograd 1970.
- [5] M.I.Kaganov, *Elektrony, fonony, magnony*, Nauka, Moskva 1979.
- [6] G.Rickayzen, *Green's Functions and Condensed Matter*, Academic Press, London 1980.
- [7] J.P.Šetrajčić, M. Pantić, B.S.Tošić and D.Lj.Mirjanić, *Phonon States in Broken-Symmetry Thin Films and Some Possible Consequences on Superconductivity*, 2-nd General Conference of the Balkan Physical Union, Izmir (Turkey) 1994.