

UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET
INSTITUT ZA FIZIKU

Природно-математички факултет
Радна бројка на научног послова

Пријем	11. febr. 1997.		
Орг. јед.	Број	Садио	Водљивост
0603	102/51		

Mr Milan Pantić

PROVODNE I SUPERPROVODNE OSOBINE
DOPIRANIH METALNIH FILMOVA

– Doktorska disertacija –

NOVI SAD, 1997.

Jedan od najvažnijih zadataka teorijskih istraživanja u bilo kojoj oblasti nauke je, otkriće one tačke, iz koje se stvari vide u njivećoj mogućoj jednostavnosti.

J. Willard GIBBS

Koristim priliku da se zahvalim svima onima koji su mi na neki način pomogli da ovu disertaciju uradim. Posebnu zahvalnost dugujem svom profesoru i mentoru *Dr Bratislavu Tošiću*, redovnom profesoru PMF-a u Novom Sadu, čija je nesebična pomoć i kritička analiza rezultata bila od velikog značaja za završavanje ovakvog obimnog posla.

Dugujem zahvalnost *Dr Ljiljani Mašković*, vanrednom profesoru PMF-a, na korisnim savetima i sugestijama tokom izrade disertacije.

Zahvaljujem se *Mr Svetislavu Lazarevu*, profesoru Više Hemijsko-tehnološke škole u Šapcu, na mnogobrojnim korisnim diskusijama i izvanrednoj saradnji.

Neizmernu zahvalnost dugujem svojoj suprudi *Dr Olgi Bodroža-Pantić*, za stručnu pomoć, razumevanje i svestranu podršku u toku rada.

Izradu ove disertacije finansijski je potpomoglo Ministarstvo za nauku i tehnologiju Republike Srbije, te im se ovom prilikom najiskrenije zahvaljujem.

Novi Sad, 28. 01. 1997. godine

Milan Pantić

Sadržaj

Uvod	5
I	6
1 Fononi u deformisanim filmovima	6
1.1 Postavka zadatka	7
1.2 Hamiltonian. Rešenje nulte aproksimacije	9
1.3 Uticaj površinske deformacije na fononska stanja i spekture	17
1.4 Analiza fononskog praga energije	25
1.5 Prostorna raspodela fononskih pobudenja	26
1.6 Deformacija kao perturbacija	29
1.7 Termodinamičke funkcije	31
II	37
2 Elektronska stanja u tankim dopiranim filmovima	37
2.1 Elektronski hamiltonijan filma. Fizički model	38
2.2 Analiza rešenja nulte aproksimacije	48
2.3 Talasna funkcija u nultoj aproksimaciji	52
2.4 Površinska deformacija i njen uticaj na spektar i stanja	54
2.5 Ravnomerna prostorna perturbacija filma	57
III	62
3 Elektron-fonon interakcija u tankim filmovima	62
3.1 Hamiltonian elektron-fonon interakcije	62
3.2 Hamiltonian elektron-fonon interakcije za film	64
3.3 Procena konstante interakcije i kritične temperature	73
IV	76
4 Transportne karakteristike tankih filmova	76
4.1 Kubo formule za kinetičke koeficijente	77
4.2 Koeficijent difuzije elektrona	79
4.3 Koeficijent termičke provodnosti	83
4.4 Koeficijent električne provodnosti	84
4.5 Videman-Francov zakon	86
Zaključak	87

A Dodatak	88
A.1 Rekurentne relacije	88
A.2 Čebiševljevi polinomi treće vrste	90
A.3 Generativne funkcije	93
A.4 Generativna funkcija Čebiševljevih polinoma treće vrste	95
Literatura	97

Uvod

U poslednjoj deceniji tehnika izarde tankih filmova je naglo napredovala tako da danas nije problem da se naprave filmovi sa dva ili tri molekularna sloja. Paralelno sa izradom filmova, razvijaju se i tehnike dopiranja, kako masivnih uzoraka tako i filmova. Sve ovo vezano je za nedavno otkriće visokotemperaturske superprovodljivosti u dopiranim keramičkim oksidima. Sami keramički oksidi ponašaju se kao niz nezavisnih tankih superprovodnih filmova pa ima razloga za verovanje da uzroke za povećanje kritične temperaturе T_c , treba tražiti u filmovima i uslovima koji se nameću granicama filmova.

Istraživanja u ovoj disertaciji imaju za cilj da ispitaju dinamičke i termodinamičke osobine tankih filmova kao i uticaj dopinga na ove osobine. U tom cilju biće ispitani fononski i elektronski podsistem u tankim filmovima kao i njihova interakcija. Na osnovu formulisanih osnovnih stavova i jednačina, posebna pažnja biće posvećena sledećim problemima:

- a) kako granični uslovi utiču na fononska stanja i fononski prag energije u filmu,
- b) koja vrsta dopinga pomera maksimum prostorne distribucije elektrona ka granicama filma. Ovo pitanje veoma je važno jer su superprovodne struje uglavnom locirane u centralnim slojevima filma i treba ih pomeriti ka granicama,
- c) koji tip elektron-fonon interakcije u filmu daje jaču efektivnu elektron-elektron interakciju. Ovo pitanje se može postaviti kada se radi o filmu jer u njemu postoji zapreminska i površinska i elektronska i fononska stanja, tako da postoji nekoliko tipova interakcije,
- d) kako granični uslovi u filmu i sama debljina filma utiču na transportne karakteristike kao što su koeficijent difuzije i koeficijent termičke i električne provodnosti. Ova istraživanja mogu imati praktičan značaj jer se veruje da je u filmovima odnos električne i termičke provodnosti veći nego u masivnoj strukturi, a ovo je opet značajno za povećanje koeficijenta korisnog dejstva pri pretvaranju elektromagnetne (svetlosne) u električnu energiju.

Navedena istraživanja ne pretenduju da budu kompletna, ali bi trebalo da daju odgovor na niz praktičnih pitanja u vezi sa korišćenjem tankih filmova.

Glava I

1 Fononi u deformisanim filmovima

Dinamička i elastična svojstva kristala su tesno povezana sa oscilacijama atoma kristalne rešetke. Atomi vrše oscilacije u blizini svojih ravnotežnih položaja u kristalu pri svim temperaturama: pri $T = 0K$ zbog kvantomehaničkih nultih oscilacija, a pri konačnim temperaturama - kao rezultat toplotnog kretanja. Spektar oscilovanja ansambla atoma može biti određen i na taj način mogu biti izračunate fizičke veličine koje karakterišu makroskopska svojstva kristala, naravno pod prepostavkom da je poznat potencijal interakcije među atomima rešetke.

Osnove dinamičke teorije kristala postavljene su pre 80 godina u klasičnim radovima Debaja, Borna i Karmana [1], [2] i u osnovnim crtama pravilno odražavaju svojstva kristala čak i u najprostijim aproksimacijama.

Poslednjih godina, međutim, opet se uočava značajan interes za izučavanje dinamičke teorije kondenzovanog stanja i to pre svega struktura kod kojih je na neki način narušena diskretna translaciona simetrija.

Činjenica je da čistih i izotropnih kristala nema. Zbog toga izučavanje neidealnih struktura ima veliki značaj jer bi rezultati takvih istraživanja imali praktičnu primenu.

Analize uticaja površina na spektar elementarnih pobudnega sprovode se već duži niz godina. Naravno, pre toga računanje spektra u kristalima obično je bilo bazirano na korišćenju tzv. cikličnih graničnih uslova tipa Born-Karmana [1].

Međutim, izučavanje idealnih (beskonačnih) struktura je korisno zbog toga što se korišćeni metodi i zaključci koji se dobijaju analizom takvih struktura, mogu primeniti ili poslužiti kao ideja vodilja prilikom ispitivanja struktura koje nisu idealne. U prvom redu to se odnosi na strukture kod kojih je narušena translaciona invarijantnost¹. Zbog toga, treba istaći činjenicu da će se prilikom ispitivanja takvih struktura koristiti slične metode kao i da će se prilikom analize vršiti poređenje sa odgovarajućim zapreminskim strukturama.

Pod neidealnošću strukture u prvom redu se podrazumeva postojanje granica sistema - najčešće se uzima da su to površine normalne na z -osu, zatim nesimetrija u rasporedu masa usled čega odgovarajuće veličine (duž z -pravca) koje karakterišu kristal (pre svega Hukove konstante elastičnosti, mase, odgovarajuća rastojanja itd.), postaju zavisni od diskretnog indeksa n_z , kao i drugi vidovi narušenja translacione invarijantnosti².

Površina kristala u suštini predstavlja dvodimenzionalni defekt [2]. Usled njegovog postojanja dolazi do narušenja diskretnе translacione simetrije kristala što konačno dovodi do pojave površinskih stanja. Takva stanja pojavljuju se u spektrima elektrona o kojima će biti reči u drugoj glavi ove disertacije, zatim kod plazmona, eksitona, feroele-

¹Poznato je, da su zakoni održanja fizičkih veličina povezani sa određenim svojstvom simetrije prostora i vremena. Tako se npr. zakon održanja impulsa čestice u slobodnom prostoru, javlja usled njegove homogenosti. Međutim, u kristalnoj rešetki homogenost prostora odsustvuje jer je hamiltonijan invarijsantan na bilo koju translaciju za vektor rešetke \vec{R} : $H(\vec{r} + \vec{R}) = H(\vec{r})$. Prema tome, pod translacionom invarijantnošću se podrazumeva novi vid simetrije prostora kristalne rešetke koji je povezan sa ovim svojstvom hamiltonijana. Fizička veličina koja se održava u prisustvu ovog vida simetrije u kristalnoj rešetki jeste **kvaziimpuls** \vec{p} fonona (ako se radi o fononskom sistemu).

²Jednom reći za takve strukture kažemo da su deformisane.

ktričnih pobuđenja, magnona itd. Analogno kolektivnim pobuđenjima atoma rešetke, moguće je definisati elementarna pobuđenja koja se nazivaju površinskim fononima. Ova stanja, za razliku od zapreminskih fononskih stanja koja su raspoređena sa podjednakom verovatnoćom u celoj zapremini kristala, su lokalizovana u uskoj oblasti duž granične površine kristala i eksponencijalno opadaju prema unutrašnjim slojevima filma.

Treba napomenuti da veoma važnu ulogu u ponašanju i načinu opisa površinskih pobuđenja, igra njihova dimenzija odnosno rastojanje na kojem slabi njihova amplituda sa udaljavanjem od površine kristala. Ako je to smanjenje dovoljno sporo i dešava se na rastojanjima koja mnogo prevazilaze mikroskopske razmere (što je kod filma konstanta rešetke a), tada se takva pobuđenja mogu opisivati fenomenološki [3]. Ove površinske oscilacije se u literaturi nazivaju oscilacije *I tipa*³.

Već spomenuta površinska pobuđenja kod kojih amplituda brzo (eksponencijalno) opada na rastojanjima poredivim sa mikroskopskim, nazivaju se površinske oscilacije *II tipa*. Ona mogu biti izučena samo u okviru mikroskopske teorije i naravno detaljno će biti analizirana u ovoj disertaciji u slučaju tankog metalnog filma. Treba napomenuti da je ona najpre bila formulisana četrdesetih godina u radovima I. M. Lifšica sa saradnicima [4], [5]. Takođe ovaj mikroskopski metod je razvijan od strane A. A. Maradudina i saradnika i dobar pregled postignutih rezultata je dat u referenci [6] kao i referencama koje su tu citirane.

1.1 Postavka zadatka

U ovoj glavi biće primenjen perturbacioni metod za analizu fononskih stanja kod tankih deformisanih struktura koji je razvijen u radu [7] i [8], i kao takav prvi put tretira deformisan film u literaturi. Ovaj metod se sa velikim uspehom može primeniti kako na fononski tako i elektronski sistem⁴. Zbog toga teorija deformisanog filma razvijena u pomenutim radovima, može da se tretira kao jedan relativno novi u prvom redu metodološki pristup.

Ako se radi o filmu koji je deformisan kako na granicama (zbog realno postojećih površina), tako i po celoj zapremini, ne postoji opšti i konzistentan metod koji bi doveo do korektnijih rezultata. To iz prostog razloga, što prilikom teorijske analize nailazimo na nepremostive matematičke teškoće i komplikacije pa čak i situacije kada ne postoji matematičko rešenje problema, ne u smislu njegove egzistencije, već u smislu njegovog nalaženja u explicitnoj formi. Zbog toga se prilikom rešavanja mora pribegavati numeričkim metodama, što podrazumeva korišćenje računara za rešavanje odgovarajućih problema.

U dosadašnjim radovima [9], [10], uglavnom je vršen prelazak na kontinuum razvojem odgovarajućih veličina u red i zadržavanjem na drugom članu u razvoju. Problem se u suštini svodio na diferencijalnu jednačinu Ermit-Veberovog tipa sa dobro poznatim rešenjima. Taj prilaz je naravno aproksimativan.

³U literaturi još poznatiji kao relejevski talasi.

⁴Treba istaći da se ovaj metod može uspešno primeniti za analizu i drugih sistema (eksitona, magnona itd.).

U ovoj glavi kao i u celoj disertaciji, akcenat će biti na egzaktnom tretiranju problema, što podrazumeva postavljanje odgovarajućih sistema diferencijalno-diferencnih jednačina i njihovim rešavanjem, pri čemu se gotovo uvek u ovakvim slučajevima može dobiti rešenje u zatvorenoj analitičkoj formi, što do sada nije bio slučaj.

Naravno ovde će biti korišćen stacionarni perturbacioni metod za određivanje energije i prostorne raspodele kolektivnih pobuđenja u deformisanim filmovima. Ideja je da se deformacija ustvari tretira kao perturbacija. Kako se radi o standardnom perturbacionom metodu, jasno je da su domeni ovog prilaza ograničeni, pre svega što se zahteva da deformacija bude mala. I pored te pretpostavke mi možemo izvući neke dovoljno opšte zaključke o posmatranom sistemu, što naravno ni na koji način ne bismo numerički mogli pouzdano izvesti.

Već smo spomenuli da jezgra ili joni kristalne rešetke imaju svoju dinamiku. Međutim, njihove putanje (tj. talasne funkcije) su vrlo ograničene zbog velikih masa (u poređenju sa masama elektrona). Ukoliko je

1. odstupanje jona od njihovih ravnotežnih položaja malo (mnogo manje od konstante rešetke),
2. za svako jezgro njegov ravnotežni položaj dobro definisan i podudara se sa čvorom kristalne (Bravove) rešetke,

možemo se ograničiti na razvoj potencijalne energije po malim amplitudama oscilacija kao u [11] - [14], i najčešće se zadržati na najnižim (kvadratnim) doprinosima⁵. Na taj način mi definišemo kao nulto polazište tzv. harmonijsku aproksimaciju. Ispostavilo se da je u mnogim zadacima dinamike kristalne rešetke sasvim opravdana ova aproksimacija [15].

Ovde će biti analizirane kolektivne mehaničke oscilacije u filmu koji je izrezan iz proste tetragonalne beskonačne strukture (videti [16]) sa konsantama reštke a_x , a_y i a_z . Unapred se pretpostavlja da do narušnja translacione simetrije dolazi samo u pravcu jedne ose (najčešće je to z -osa), tj. film ima relativno malu debljinu duž z -pravca. U XOY ravnima normalnim na z -pravac, film će biti tretiran kao idealna beskonačna struktura, što znači da se u tim ravnima translaciona invarijantnost održava. Takođe, radi uprošćenja računa će biti pretpostavljeno da su torzioni koeficijenti elastičnosti zanemarivi u odnosu na Hukove koeficijente elastičnosti, tj.

$$C_{\alpha\beta,n_z} = C_{\alpha,n_z} \delta_{\alpha\beta}, \quad \alpha, \beta = (x, y, z). \quad (1.1)$$

⁵Tako ne možemo tretirati:

1. difuziju jona prisutnu kod npr. superjonskih provodnika,
2. statične periodične deformacije - (treba razvijati oko novih položaja ravnoteže)
3. fazni prelaz u tečno stanje - topljenje,
4. kretanje lakih jezgara (čvrsti helijum) i slično.

Nezavisno od tipa deformacije duž z -pravca, postaje jasno da svi važni fizički parametri filma, između ostalog mase, konstante elastičnosti ali i impulsi i atomski pomeraji, postaju zavisni od rešetkinog indeksa n_z , tj. $M \rightarrow M_{n_z}$, $C_\alpha \rightarrow C_{\alpha,n_z}$, $n_z = 0, 1, 2, \dots, N_z$.

1.2 Hamiltonian. Rešenje nulte aproksimacije

Harmonijski hamiltonijan fononskog sistema opisanog filma u aproksimaciji najbližih suseda može biti napisan na sledeći način [17]

$$H = H_S + H_B , \quad (1.2)$$

gde je

$$\begin{aligned} H_S &= \frac{1}{4} \sum_{\alpha, n_x, n_y} \{ 2C_{\alpha,-1} u_{\alpha; n_x, n_y, 0}^2 + 2C_{\alpha, N_z+1} u_{\alpha; n_x, n_y, N_z}^2 + \\ &+ C_{\alpha, 0} [(u_{\alpha; n_x+1, n_y, 0} - u_{\alpha; n_x, n_y, 0})^2 + (u_{\alpha; n_x-1, n_y, 0} - u_{\alpha; n_x, n_y, 0})^2 + \\ &+ (u_{\alpha; n_x, n_y+1, 1} - u_{\alpha; n_x, n_y, 0})^2 + (u_{\alpha; n_x, n_y-1, 0} - u_{\alpha; n_x, n_y, 0})^2 + \\ &+ (u_{\alpha; n_x, n_y, 1} - u_{\alpha; n_x, n_y, 0})^2] + \\ &+ C_{\alpha, N_z} [(u_{\alpha; n_x+1, n_y, N_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, N_z})^2 + (u_{\alpha; n_x-1, n_y, N_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, N_z})^2 + \\ &+ (u_{\alpha; n_x, n_y+1, N_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, N_z})^2 + (u_{\alpha; n_x, n_y-1, N_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, N_z})^2 + \\ &+ (u_{\alpha; n_x, n_y, N_z+1} - u_{\alpha; n_x, n_y, N_z})^2] \} \end{aligned} \quad (1.3)$$

i

$$\begin{aligned} H_B &= \frac{1}{2} \sum_{\alpha, n_x, n_y} \sum_{n_z=0}^{N_z} \frac{1}{M_{n_z}} p_{\alpha; n_x, n_y, n_z}^2 + \frac{1}{4} \sum_{\alpha, n_x, n_y} \sum_{n_z=1}^{N_z-1} C_{\alpha, n_z} \times \\ &\times [(u_{\alpha; n_x+1, n_y, n_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z})^2 + (u_{\alpha; n_x-1, n_y, n_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z})^2 + \\ &+ (u_{\alpha; n_x, n_y+1, n_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z})^2 + (u_{\alpha; n_x, n_y-1, n_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z})^2 + \\ &+ (u_{\alpha; n_x, n_y, n_z+1} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z})^2 + (u_{\alpha; n_x, n_y, n_z-1} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z})^2] , \end{aligned} \quad (1.4)$$

pri čemu H_S - sadrži doprinose graničnih slojeva, a H_B - unutrašnjosti filma. U ovim formulama u_α su projekcije atomskog pomaka, $p_\alpha = M \dot{u}_\alpha$ su odgovarajući impulsi, M su mase atoma i C_α su Hukove konstante elastičnosti. Indeks $\alpha = x, y, z$ označava projekciju na odgovarajuće ose Dekartovog sistema, dok rešetkini indeksi n_x, n_y i n_z

leže u intervalima

$$n_\beta \in \begin{cases} \left[-\frac{N_\beta}{2} + 1, \frac{N_\beta}{2} \right], & N_\beta \text{ parno}, \\ \left[\frac{-N_\beta + 1}{2}, \frac{N_\beta - 1}{2} \right], & N_\beta \text{ neparno}, \end{cases} \quad \beta = x, y, \quad (1.5)$$

$$n_z \in [0, N_z] , \quad N_x \approx N_y \sim 10^8 , \quad N_z \ll N_x, N_y .$$

Kako su slojevi $n_z \leq -1$ i $n_z \geq N_z + 1$ odsutni, uzeto je da su odgovarajući pomaci jednaki nuli, tj.

$$u_{\alpha;n_x,n_y,-1} = u_{\alpha;n_x,n_y,N_z+1} = 0 . \quad (1.6)$$

Prepostavimo da su promene masa i konstanti elastičnosti date na sledeći način

$$M_{n_z} = M + \mu_{n_z} , \quad (1.7)$$

$$C_{\alpha,n_z} = C_\alpha + \gamma_{n_z} \quad (1.8)$$

gde je M - masa atoma ili molekula u nespaterovanoj matrici, a μ_{n_z} predstavlja korekciju mase usled dopiranja.

Kako se u analizi koristi stacionarni perturbacioni metod, jasno je da mora biti ispunjen uslov

$$\frac{|\mu_{n_z}|}{M} \ll 1 . \quad (1.9)$$

U jednačini (1.8) C_α - predstavlja Hukovu konstantu elastičnosti nedeformisanog filma, dok je γ_{n_z} korekcija usled deformacije. I u ovom slučaju prturbacija mora biti mala, tj.

$$\frac{|\gamma_{n_z}|}{C_\alpha} \ll 1 . \quad (1.10)$$

S druge strane, u hamiltonijan (1.2) ulaze površinske Hukove konstante $C_{\alpha,-1}$ i C_{α,N_z+1} , jer se jedino u tom slučaju dobijaju rezultati koji su kompatibilni sa eksperimentalnim činjenicama. Za njih ćemo prepostaviti da se razlikuju od odgovarajućih u balku, dodavanjem proizvoljnih konstantnih koeficijenata tzv. površinskih parametara a i b koji su u opštem slučaju dati sa

$$C_{\alpha,-1} = C_\alpha(1 + a) , \quad (1.11)$$

$$C_{\alpha,N_z+1} = C_\alpha(1 + b) . \quad (1.12)$$

Na taj način, menjanjem ovih parametara mi dobijamo različite modele graničnih uslova. S obzirom da u hamiltonijan sistema masa ulazi kao $1/M_{n_z}$, tada na osnovu (1.7) možemo uzeti sledeće

$$\frac{1}{M_{n_z}} = \frac{1}{M + \mu_{n_z}} = \frac{1}{M} \frac{1}{1 + \frac{\mu_{n_z}}{M}} \simeq \frac{1}{M} - \frac{\mu_{n_z}}{M^2} . \quad (1.13)$$

U skladu sa navedenim prepostavkama, hamiltonijan fononskog sistema je oblika

$$H = H_0 + H_{int} , \quad (1.14)$$

gde je

$$H_0 = H_{0S} + H_{0B} \quad (1.15)$$

i

$$H_{int} = H_{int}^S + H_{int}^B. \quad (1.16)$$

Da bismo izostavili nepotrebna ponavljanja u prepisivanju, recimo da se hamiltonijan H_{0S} dobija iz (1.3) zamenom C_{α,n_z} sa C_α kao i relacija (1.11) i (1.12), a u H_{0B} zamenom M_{n_z} i C_{α,n_z} u (1.4) sa M i C_α . Hamiltonijan interakcije H_{int} , odnosno H_{int}^S i H_{int}^B , se dobijaju ako se umesto C_{α,n_z} zameni γ_{α,n_z} odnosno $M_{n_z}^{-1} \rightarrow -\mu_{n_z} M^{-2}$.

Da bismo rešili svojstveni problem Hamiltonijana H_0 koji je gore obrazložen, formiramo jednačine kretanja za operatore $u_{\vec{n}}$ i $p_{\vec{n}}$ na sledeći način

$$i\hbar \dot{u}_{\vec{n}}^\alpha = [u_{\vec{n}}^\alpha, H_0], \quad i\hbar \dot{p}_{\vec{n}}^\alpha = [p_{\vec{n}}^\alpha, H_0], \quad \vec{n} \in (n_x, n_y, n_z). \quad (1.17)$$

Uzimajući u obzir komutacione relacije $[u_{\vec{n}}^\alpha, p_{\vec{m}}^\beta] = i\hbar \delta_{\vec{n}\vec{m}} \delta_{\alpha\beta}$, možemo ove dve jednačine (1.17) spojiti u jednu koja sadrži samo pomeraje u .

Na taj način dobijamo sistem od $N_z + 1$ diferencijalno-diferencnih jednačina

$$\{n_z = 0\}$$

$$\ddot{u}_{\alpha;n_x, n_y, 0} - \Omega_\alpha^2 (u_{\alpha;n_x+1, n_y, 0} + u_{\alpha;n_x-1, n_y, 0} - u_{\alpha;n_x, n_y, 0} - u_{\alpha;n_x, n_y, 0} + \quad (1.18)$$

$$+ u_{\alpha;n_x, n_y+1, 0} + u_{\alpha;n_x, n_y-1, 0} - 2u_{\alpha;n_x, n_y, 0} + u_{\alpha;n_x, n_y, 1} - 2(1+a)u_{\alpha;n_x, n_y, 0}) = 0,$$

$$\{1 \leq n_z \leq N_z - 1\}$$

$$\ddot{u}_{\alpha;n_x, n_y, n_z} - \Omega_\alpha^2 (u_{\alpha;n_x+1, n_y, n_z} + u_{\alpha;n_x-1, n_y, n_z} - 2u_{\alpha;n_x, n_y, n_z} + u_{\alpha;n_x, n_y+1, n_z}$$

$$+ u_{\alpha;n_x, n_y-1, n_z} - 2u_{\alpha;n_x, n_y, n_z} + u_{\alpha;n_x, n_y, n_z+1} + u_{\alpha;n_x, n_y, n_z-1} - 2u_{\alpha;n_x, n_y, n_z}) = 0, \quad (1.19)$$

$$\{n_z = N_z\}$$

$$\ddot{u}_{\alpha;n_x, n_y, N_z} - \Omega_\alpha^2 (u_{\alpha;n_x+1, n_y, N_z} + u_{\alpha;n_x-1, n_y, N_z} - u_{\alpha;n_x, n_y, N_z} - u_{\alpha;n_x, n_y, N_z} + \quad (1.20)$$

$$+ u_{\alpha;n_x, n_y+1, N_z} + u_{\alpha;n_x, n_y-1, N_z} - 2u_{\alpha;n_x, n_y, N_z} + u_{\alpha;n_x, n_y, N_z-1} - 2(1+b)u_{\alpha;n_x, n_y, N_z}) = 0,$$

gde je

$$\Omega_\alpha^2 = \frac{C_\alpha}{M} \quad (1.21)$$

fononska frekvencija.

Već smo naglasili da se translaciona invarijantnost održava po svim XOY ravnima. To znači da ćemo rešenje sistema jednačina (1.18) – (1.20) za atomske pomeraje tražiti

u obliku superpozicije proizvoda nepoznate funkcije (duž z -pravca) i harmonijske funkcije položaja (u XOY ravni) [17], tj.

$$u_{\alpha;n_x,n_y,n_z}(t) = \sum_{k_x,k_y,\nu_z} S_{\alpha;k_x,k_y,\nu_z} \mathcal{A}_{\alpha;\nu_z,n_z} \times \\ \times \{ b_{\alpha;k_x,k_y,\nu_z} e^{i(n_x a_x k_x + n_y a_y k_y) - it\omega_{\alpha;k_x,k_y,\nu_z}} + b_{\alpha;k_x,k_y,\nu_z}^+ e^{-i(n_x a_x k_x + n_y a_y k_y) + it\omega_{\alpha;k_x,k_y,\nu_z}} \}, \quad (1.22)$$

gde je $S_{\alpha;k_x,k_y,\nu_z}$ - faktor normiranja, $\mathcal{A}_{\alpha;\nu_z,n_z}$ - su neodredene amplitude koje zavise od n_z , $b_{\alpha;k_x,k_y,\nu_z}^+$ i $b_{\alpha;k_x,k_y,\nu_z}$ - su fononski kreacioni i anihilacioni operatori, $\omega_{\alpha;k_x,k_y,\nu_z}$ - su fononske frekvencije i

$$k_\beta = \frac{2\pi\nu_\beta}{N_\beta a},$$

$$\nu_\beta \in \begin{cases} \left[-\frac{N_\beta}{2} + 1, \frac{N_\beta}{2} \right], & N_\beta \text{ parno}, \\ \left[-\frac{N_\beta - 1}{2}, \frac{N_\beta - 1}{2} \right], & N_\beta \text{ neparno}, \end{cases} \quad \beta = x, y \quad (1.23)$$

su komponente talasnog vektora u XOY ravni koje odgovaraju stanjima slobodnih elektrona u provodnoj zoni.

Nakon supstitucije (1.22), sistem jednačina (1.18) – (1.20) se redukuje u sistem jednačina za nepoznate amplitude ($\mathcal{A}_0, \mathcal{A}_1, \dots, \mathcal{A}_{N_z}$) duž z -pravca

$$\mathcal{A}_{\alpha;\nu_z,1} + (\rho_{\alpha;k_x,k_y,\nu_z} - a)\mathcal{A}_{\alpha;\nu_z,0} = 0, \quad n_z = 0, \quad (1.24)$$

$$\mathcal{A}_{\alpha;\nu_z,n_z+1} + \mathcal{A}_{\alpha;\nu_z,n_z-1} + \rho_{\alpha;k_x,k_y,\nu_z}\mathcal{A}_{\alpha;\nu_z,n_z} = 0, \quad 1 \leq n_z \leq N_z - 1, \quad (1.25)$$

$$\mathcal{A}_{\alpha;\nu_z,N_z-1} + (\rho_{\alpha;k_x,k_y,\nu_z} - b)\mathcal{A}_{\alpha;\nu_z,N_z} = 0, \quad n_z = N_z, \quad (1.26)$$

gde je

$$\rho_{\alpha;k_x,k_y,\nu_z} = \frac{\omega_{\alpha;k_x,k_y,\nu_z}^2}{\Omega_\alpha^2} - 4 \left[\sin^2\left(\frac{a_x k_x}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{a_y k_y}{2}\right) \right] - 2. \quad (1.27)$$

Determinanta sistema jednačina (1.24) – (1.26) ima oblik

$$\mathcal{D}_{N_z+1}(\rho, a, b) = \begin{vmatrix} (\rho - a) & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & \rho & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \rho & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \rho & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & & \ddots & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \rho & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & \rho & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & \rho & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & (\rho - b) \end{vmatrix}. \quad (1.28)$$

Razvojem gornje determinante po prvoj i poslednjoj vrsti (koloni) dobija se sledeća kompaktna forma

$$\mathcal{D}_{N_z+1}(\rho, a, b) = C_{N_z+1}(\rho) - (a+b)C_{N_z}(\rho) + abC_{N_z-1}(\rho), \quad (1.29)$$

gde su $C_n(\rho)$ Čebiševljevi polinomi treće vrste (videti dodatak) koji zadovoljavaju sledeću diferencnu jednačinu: $C_{n+1} + C_{n-1} = \rho C_n$, sa početnim uslovima $C_0 = 1$ i $C_1 = \rho$.

Polazeći od činjenice da su koreni polinoma $\mathcal{D}_{N_z+1}(\rho, a, b)$ realni i jednostruki, i da je njihov broj jednak broju slojeva u filmu, njihovim određivanjem mi zapravo dobijamo oscilatorne energije (zakon disperzije) u posmatranom tankom filmu.

Na osnovu (1.27) konačno možemo pisati

$$\omega_{\alpha; k_x, k_y, \nu_z} = 2\Omega_\alpha \sqrt{\sin^2\left(\frac{a_x k_x}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{a_y k_y}{2}\right) + \Delta_{\nu_z}^\alpha(a, b, N_z)}. \quad (1.30)$$

Izraz (1.30) predstavlja zakon disperzije fononskog sistema u tankom filmu. Veličina $\Delta_{\nu_z}^\alpha(a, b, N_z)$ u opštem slučaju se dobija iz transcendentne jednačine koja će kasnije biti detaljno analizirana.

Najpre razmotrimo slučaj kada su parametri površinske deformacije jednaki nuli, tj. $a = b = 0$. U tom slučaju determinanta (1.28) postaje ustvari Čebiševljev polinom treće vrste

$$\mathcal{D}_{N_z+1}(\rho, 0, 0) \equiv C_{N_z+1}(\rho) = \begin{vmatrix} \rho & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & \rho & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \rho & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \rho & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & & \ddots & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \rho & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & \rho & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & \rho & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & \rho \end{vmatrix}, \quad \rho = \rho_{\alpha; k_x, k_y, \nu_z}. \quad (1.31)$$

U slučaju kada je $|\rho| < 2$, dobijamo zapreminska stanja i gornja determinanta može biti zapisana u ekvivalentnoj formi kao

$$\mathcal{D}_{N_z+1}(\rho, 0, 0) = C_{N_z+1}(\rho) = \frac{\sin[(N_z + 2)\xi]}{\sin \xi}, \quad (1.32)$$

$$\sin \xi \neq 0, \quad \rho = 2 \cos \xi.$$

Iz uslova netrivijalnosti rešenja sistema (1.24) - (1.26), determinanta sistema odnosno izraz (1.32) mora biti jednak nili. Nule gornje jednačine su

$$\rho_{\nu_z} = 2 \cos\left(\frac{\pi}{N_z + 2}\nu\right), \quad \nu = 1, 2, \dots, N_z + 1. \quad (1.33)$$

Tada je zakon disperzije

$$\omega_{\alpha; k_x, k_y, \nu_z} = 2\Omega_\alpha \sqrt{\sin^2\left(\frac{a_x k_x}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{a_y k_y}{2}\right) + \cos^2\left(\frac{\pi}{2(N_z + 2)}\nu_z\right)}. \quad (1.34)$$

Smenom indeksa $\mu_z = N_z + 2 - \nu_z$; $\nu_z = 1, 2, \dots, N_z + 1$, formula (1.34) može biti napisana u simetričnom obliku

$$\omega_{\alpha;k_x,k_y,\nu_z} = 2\Omega_\alpha \sqrt{\sin^2\left(\frac{a_x k_x}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{a_y k_y}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{a_z k_z}{2}\right)} \quad (1.35)$$

gde je

$$k_z = \frac{\pi \nu_z}{(N_z + 2)a_z}, \quad \nu_z = 1, 2, \dots, N_z + 1, \quad (1.36)$$

z - komponenta talasnog vektora. S obzirom da je $(k_z)_{min} \neq 0$, vidi se da u fononskom spektru postoji prag (gep) (videti [16]-[18]) iako je film isečen iz proste rešetke.

Određivanjem energija (1.35) mi smo dijagonalizovali naš polazni hamiltonijan H_0 , pa konačno možemo pisati

$$H_0 = \sum_{\alpha;k_x,k_y,\nu_z} E_{\alpha;k_x,k_y,\nu_z}^{(0)} (b_{\alpha;k_x,k_y,\nu_z}^+ b_{\alpha;k_x,k_y,\nu_z} + \frac{1}{2}), \quad (1.37)$$

gde je

$$E_{\alpha;k_x,k_y,\nu_z}^{(0)} = \hbar \omega_{\alpha;k_x,k_y,\nu_z} \quad (1.38)$$

energija fonona u tankom filmu u nultoj aproksimaciji. S obzirom na činjenicu da koreni Čebiševljevih polinoma (1.32) leže u otvorenom intervalu $(-2, 2)$, takav tip deformacije ($a = b = 0$) „dopušta” postojanje samo zapreminske stanja.

Pošto su određene oscilatorne energije odnosno frekvencije, sada je potrebno naći odgovarajuće amplitude $\mathcal{A}_{\alpha,\nu_z,n_z}$. Njih možemo dobiti rešavanjem sistema jednačina (1.24) - (1.26).

Deljenjem ovih jednačina sa $\mathcal{A}_{\alpha,\nu_z,0}$, dati sistem jednačina svodimo na sledeći sistem od $N + 2$ linearne jednačine po nepoznatim $\mathcal{B}_0, \mathcal{B}_1, \dots, \mathcal{B}_{N_z}$

$$\mathcal{B}_0 = 1, \quad (1.39)$$

$$\mathcal{B}_1 + \rho \mathcal{B}_0 = 0, \quad n_z = 0 \quad (1.40)$$

$$\mathcal{B}_0 + \rho \mathcal{B}_1 + \mathcal{B}_2 = 0, \quad n_z = 1 \quad (1.41)$$

$$\mathcal{B}_1 + \rho \mathcal{B}_2 + \mathcal{B}_3 = 0, \quad n_z = 2 \quad (1.42)$$

.

$$\mathcal{B}_{N_z-2} + \rho \mathcal{B}_{N_z-1} + \mathcal{B}_{N_z} = 0, \quad n_z = N_z - 1 \quad (1.43)$$

$$\mathcal{B}_{N_z-1} + \rho \mathcal{B}_{N_z} = 0, \quad n_z = N_z \quad (1.44)$$

gde je

$$\mathcal{B}_{n_z} \equiv \mathcal{B}_{\alpha, \nu_z, n_z} = \frac{\mathcal{A}_{\alpha, \nu_z, n_z}}{\mathcal{A}_{\alpha, \nu_z, 0}}. \quad (1.45)$$

Primetimo da rešenja gornjeg sistema linearnih jednačina predstavljaju članove niza \mathcal{B}_n ($1 \leq n_z \leq N_z - 1$) koji zadovoljavaju rekurentnu relaciju

$$\mathcal{B}_{n_z-1} + \rho \mathcal{B}_{n_z} + \mathcal{B}_{n_z+1} = 0, \quad 1 \leq n_z \leq N_z - 1, \quad (1.46)$$

sa početnim uslovima $\mathcal{B}_0 = 1$ i $\mathcal{B}_1 = -\rho$, pri čemu imamo još jedan dodatni uslov za ρ^6 :

$$\mathcal{B}_{N_z-1} + \rho \mathcal{B}_{N_z} = 0, \quad \text{za } n_z = N_z.$$

Karakteristična jednačina diferencne jednačine (1.46) je

$$r^2 + \rho r + 1 = 0. \quad (1.47)$$

Koreni ove jednačine su

$$r_{1,2} = \frac{-\rho \pm \sqrt{\rho^2 - 4}}{2}. \quad (1.48)$$

Najpre razmotrimo slučaj kada je $r_1 \neq r_2$ i $|\rho| < 2$. Tada je opšte rešenje jednačine (1.46) oblika

$$\mathcal{B}_{n_z} = Dr_1^{n_z} + Er_2^{n_z}. \quad (1.49)$$

Nepoznate koeficijente $D = D(\rho)$ i $E = E(\rho)$, odredićemo iz početnih uslova. Elementarnim računom dobijamo

$$D = \frac{\rho + \sqrt{\rho^2 - 4}}{2\sqrt{\rho^2 - 4}}, \quad E = \frac{\sqrt{\rho^2 - 4} - \rho}{2\sqrt{\rho^2 - 4}}. \quad (1.50)$$

Tada, na osnovu (1.49), rešenje (1.46) je oblika

$$\begin{aligned} \mathcal{B}_{n_z} = & \frac{1}{2\sqrt{\rho^2 - 4}} \left[\left(\rho + \sqrt{\rho^2 - 4} \right) \left(\frac{-\rho - \sqrt{\rho^2 - 4}}{2} \right)^{n_z} + \right. \\ & \left. + \left(-\rho + \sqrt{\rho^2 - 4} \right) \left(\frac{-\rho + \sqrt{\rho^2 - 4}}{2} \right)^{n_z} \right], \end{aligned} \quad (1.51)$$

uz granični uslov (1.44), tj. $\mathcal{B}_{N_z-1}/\mathcal{B}_{N_z} = -\rho$.

Ako je $|\rho| < 2$, što odgovara zapreminskim stanjima, tada je

$$\rho = 2 \cos \xi, \quad (1.52)$$

i $r_{1,2} = -\cos \xi \pm i \sin \xi$. U ovom slučaju za koeficijente (1.50) dobijamo

$$D = \frac{1}{2} \left(1 - i \frac{\cos \xi}{\sin \xi} \right), \quad E = \frac{1}{2} \left(1 + i \frac{\cos \xi}{\sin \xi} \right). \quad (1.53)$$

⁶Ovaj uslov ćemo ubuduće zvati graničnim uslovom za dati niz.

Zamenom (1.53) u (1.51) i nakon sredivanja dobijamo konačan izraz za amplitudu oscilovanja odnosno pomeraje

$$\mathcal{A}_{\alpha,\nu_z,n_z} = (-1)^{n_z} \frac{\sin[(n_z + 1)\xi_{\nu_z}]}{\sin \xi_{\nu_z}} \mathcal{A}_{\alpha,\nu_z,0}, \quad (1.54)$$

$$u_{\alpha;n_x,n_y,n_z}(t) = (-1)^{n_z} \sum_{k_x,k_y,\nu_z} S_{\alpha;k_x,k_y,\nu_z} \mathcal{A}_{\alpha,\nu_z,n_z} \times \\ \times \{ b_{\alpha;k_x,k_y,\nu_z} e^{i(n_x a_x k_x + n_y a_y k_y) - it\omega_{\alpha;k_x,k_y,\nu_z}} + h.c. \} \frac{\sin[(n_z + 1)\xi_{\nu_z}]}{\sin \xi_{\nu_z}}, \quad (1.55)$$

pri čemu na osnovu (1.36) za ξ_{ν_z} važi

$$\xi_{\nu_z} = \frac{\pi \nu_z}{N_z + 2}, \quad \nu_z = 1, 2, \dots, N_z + 1. \quad (1.56)$$

Granični uslov (1.44) se svodi na $C_{N_z+1} = 0$, što zapravo predstavlja jednačinu za određivanje energije sistema.

Kako je $p_{\alpha;n_x,n_y,n_z}(t) = M \dot{u}_{\alpha;n_x,n_y,n_z}(t)$ nalaženjem prvog izvoda od $u_{\alpha;n_x,n_y,n_z}$ po vremenu i zamenom u polazni hamiltonijan (1.2) on postaje dijagonalan (1.37). Pri tome je izabранo da je

$$\frac{S_{\alpha;k_x,k_y,\nu_z} \mathcal{A}_{\alpha,\nu_z,0}}{\sin \xi_{\nu_z}} = \sqrt{\frac{\hbar}{MN_x N_y (N_z + 2) \omega_{\alpha;k_x,k_y,\nu_z}}},$$

i za atomske pomake u ovom slučaju konačno možemo pisati

$$u_{\alpha;n_x,n_y,n_z}(t) = (-1)^{n_z} \sum_{k_x,k_y,\nu_z} \sqrt{\frac{\hbar}{MN_x N_y (N_z + 2) \omega_{\alpha;k_x,k_y,\nu_z}}} \times \\ \times \{ b_{\alpha;k_x,k_y,\nu_z} e^{i(n_x a_x k_x + n_y a_y k_y) - it\omega_{\alpha;k_x,k_y,\nu_z}} + h.c. \} \sin[(n_z + 1)\xi_{\nu_z}]. \quad (1.57)$$

Upoređujući dobijene rezultate sa odgovarajućim za idealne beskonačne strukture, može se zaključiti sledeće:

- Mehaničke vibracije u idealnoj beskonačnoj strukturi su ravni talasi u svim pravcima [11]-[13], a mehaničke vibracije u tankom filmu (u skladu sa formulom (1.57)) su spoj stojećih talasa u z -pravcu i ravnih talasa u XOY ravni. Jasno je da duž ovog pravca nema nikakvog prenosa vibracione energije.
- Tri akustičke frekvencije u idealnim strukturama teže nuli kada $k \rightarrow 0$. S druge strane, minimalne frekvencije u tankom filmu su u skladu sa (1.35), date sa

$$\min\{\omega_{\alpha;k_x,k_y,\nu_z}\} = \omega_{\alpha;0,0,1} = 2\Omega_\alpha \sin\left(\frac{\pi}{2(N_z + 2)}\right) \neq 0. \quad (1.58)$$

To znači da fononi u tankim filmovima poseduju geopol $\hbar\omega_{\alpha;0,0,1}$, odakle sledi da je pripadna aktivaciona temperatura filma

$$T_{ac}^\alpha = \frac{\hbar\omega_{\alpha;0,0,1}}{k_B} = \frac{2\hbar}{k_B} \Omega_\alpha \sin\left(\frac{\pi}{2(N_z + 2)}\right), \quad (1.59)$$

tj. temperatura neophodna za ekscitaciju fonona u filmu i ima konačnu pozitivnu vrednost. Vidi se da aktivaciona temperatura opada sa povećanjem debljine filma tj. sa porastom N_z . Za izuzetno tanke filmove aktivaciona temperatura je relativno visoka.

Amplitude pomeraja (1.57) su periodične funkcije po celom kristalu (stanja nisu lokalizovana) i takav tip kolektivnih oscilatornih pobudjenja kojima odgovara ovakva funkcija pomeraja nazivaju se zapreminske.

U slučaju kada su a i b različiti od nule, dozvoljene vrednosti energije u filmu se moraju odrediti iz transcendentne jednačine koja se dobija iz (1.29).

U zavisnosti od parametara a i b , sada se u sistemu mogu pored zapreminskih pojaviti i površinska ili lokalizovana stanja⁷, što je i bilo za očekivati s obzirom da postoji granice u sistemu. Najpre razmotrimo slučaj zapreminskih stanja, a potom uslove pod kojima se pojavljuju i lokalizovana pobudjenja u posmatranom sistemu.

1.3 Uticaj površinske deformacije na fononska stanja i spekture

Ovde će biti ispitani uticaj parametara površinske deformacije a i b na oscilatorni spektar i prostornu raspodelu pobudjenja. Razmotrimo najpre slučaj zapreminskih stanja. Tada je

$$C_{n_z}(\rho_\nu) = \frac{\sin[(n_z + 1)\xi_\nu]}{\sin \xi_\nu}, \quad \sin \xi_\nu \neq 0, \quad (1.60)$$

$$\rho_\nu = 2 \cos \xi_\nu, \quad \nu = 1, 2, \dots, N_z + 1.$$

Zamenjujući ovaj izraz u (1.29), dolazimo do sledeće transcendentne jednačine za određivanje energije

$$\cot(N_z + 2)\xi_\nu = \frac{1 - (a + b) \cos \xi_\nu + ab \cos 2\xi_\nu}{ab \sin 2\xi_\nu - (a + b) \sin \xi_\nu}, \quad (1.61)$$

$$0 < \xi_\nu < \pi; \quad \nu = 1, 2, \dots, N_z + 1.$$

Kako funkcija $\cot(N_z + 2)\xi_\nu$ ima period $\pi/(N_z + 2)$, očigledno ona u intervalu $[0, \pi]$ ima $(N_z + 2)$ -perioda i $(N_z + 2)$ puta preseca ξ osu. Vrednosti za ξ se u opštem slučaju mogu naći samo numerički ili grafički. Zamenom korena u jednačinu za fononske frekvencije (1.30), dobijamo spektar elementarnih pobudjenja fononskog sistema u tankom filmu

$$\omega_{\alpha; k_x, k_y, \nu_z} = 2\Omega_\alpha \sqrt{\sin^2\left(\frac{a_x k_x}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{a_y k_y}{2}\right) + \Delta_\nu^\alpha(a, b, N_z)}, \quad (1.62)$$

gde

$$\Delta_\nu^\alpha(a, b, N_z) = \frac{1}{2}(1 + \cos \xi_\nu); \quad \nu = 1, 2, \dots, N_z + 1, \quad (1.63)$$

⁷Pod ovim pojmom se u literaturi (videti [2]) podrazumevaju i stanja koja su locirana u okolini primesa, vakancija, raznih defekata itd.

predstavlja fononski gep u posmatranom filmu, a ξ_ν su koreni koji se određuju iz trascendentne jednačine (1.61). Iz relacije (1.62) se vidi da spektar fononskih pobuđenja u filmu ima tzv. aktivacioni karakter [20], što znači da je najniža fononska frekvencija različita od nule. Najnižu oscilatornu frekvenciju daje rešenje $\xi_\nu = \xi_N$, koje odgovara preseku u intervalu $[\frac{N_z + 1}{N_z + 2}\pi, \pi]$, jer je za njega $1 + \cos \xi$ najbliže nuli. Ovaj novi efekat (procep u fononskom spektru) je očigledno posledica realnog prisustva granica kod film-struktura. Gep je veći ukoliko je film tanji. U slučaju velikog N_z , važi $\lim_{N_z \rightarrow \infty} \frac{N_z + 1}{N_z + 2} \rightarrow 1$, pa je $\xi_{N_z} = \pi$ odnosno $\cos \pi = -1$, što znači da gep izčezava kao i u odgovarajućoj idealnoj beskonačnoj strukuri.

Logično se nameće pitanje: da li za

$$\rho_\nu = 2 \cos \xi_\nu, \quad \nu = 1, 2, \dots, N_z + 1, \quad (1.64)$$

funkcija na desnoj strani (1.61) uvek ima $(N_z + 1)$ presek sa $\cot(N_z + 2)\xi$?

Jednačina (1.61) na desnoj strani ne zavisi od broja slojeva N_z već samo od površinskih parametara a i b . U tom smislu posmatraćemo sledeća tri karakteristična slučaja. Najpre prepostavimo da su površinski parametri pozitivni ($a, b > 0$), tj.

- 1) a i b pripadaju otvorenom intervalu $(0, 1)$. Tada jednačina (1.61) na desnoj strani u intervalu $(0, \pi)$ je neprekidna i u tom slučaju postoji $(N_z + 1)$ - koren odnosno presek sa funkcijom $\cot(N_z + 2)\xi$. Prema tome ta stanja odgovaraju zapreminskim i pripadaju otvorenom intervalu $(-2, 2)$.
- 2) $a = 1$ i $b = 1$. U ovom slučaju funkcija ima vertikalnu asimptotu u tački $\xi = 0$, jer imenilac na desnoj strani jednačine (1.61) izčezava, tj.

$$\sin 2\xi - 2 \sin \xi = 0 \Rightarrow \cos \xi = 1.$$

Jedan presek je „nestao“ jer je zabranjena vrednost $\xi = 0$ ako tražimo rešenja pomoću (1.60). Tada osim N_z korena koji odgovaraju zapreminskim stanjima, postoji jedno rešenje⁸ koje odgovara površinskom stanju. To su stanja koja su lokalizovana oko graničnih površina kristalnog filma. Međutim, važno je istaći činjenicu da u slučaju stanja sa $|\rho| > 2$, ne mora u opštem slučaju da budu površinska. Za ta stanja po definiciji važi da im amplituda eksponencijalno opada ka unutrašnjosti filma.

- 3) $a > 1$ i $b > 1$. Tada u sistemu osim zapreminskih, postoje i stanja sa $|\rho| > 2$.

Uslov za pojavu ovih ($|\rho| > 2$) stanja se može odrediti jednostavnim zahtevom da funkcija na desnoj strani jednačine (1.61) ima vertikalnu asimptotu, što se svodi na sledeće

$$\cos \xi = \frac{a+b}{2ab}, \quad 0 \leq \frac{a+b}{2ab} \leq 1. \quad (1.65)$$

Ovo de fakto predstavlja uslov za pojavu i egzistenciju i površinskih stanja u posmatranom sistemu.

⁸Ovaj presek (koren) je izvan intervala $(-2, 2)$ i prema tome ne može se očekivati presek krivih u jednačini (1.61) za date vrednosti parametara.

Tada je⁹

$$C_n(\rho) = \frac{\sinh[(n+1)\eta]}{\sinh \eta} , \quad \rho = 2 \cosh \eta , \quad \eta > 0 . \quad (1.66)$$

Zamenom (1.66) u jednačinu (1.29) dolazimo do izraza za određivanje energija ovih ($|\rho| > 2$) stanja. I u ovom slučaju to je transcendentna jednačina koja ima sledeći oblik

$$\coth(N_z + 2)\eta = \frac{1 - (a+b)\cosh \eta + ab \cosh 2\eta}{ab \sinh 2\eta - (a+b) \sinh \eta} , \quad \eta > 0 . \quad (1.67)$$

U ovom slučaju izraz (1.62) za energiju odgovarajućih vibracionih stanja je oblika

$$E = 2\Omega_\alpha \sqrt{\sin^2\left(\frac{a_x k_x}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{a_y k_y}{2}\right) + \frac{1}{2}(1 + \cosh \eta)} , \quad (1.68)$$

pri čemu se η dobija kao rešenje gornje trancendentne jednačine. Iz ove jednačine se vidi da je u dugotalasnoj aproksimaciji ovaj izraz različit od nule, tj. postoji gep u fononskom spektru. U ovom slučaju njegova minimalna vrednost je različita od nule i veća je nego u slučaju zapreminskih stanja (kada je $|\rho| < 2$).

Radi lakše analize uzmimo slučaj simetrične deformacije¹⁰, tj. kada je $a = b$. Očigledno uslov (1.65) za pojavu navedenih stanja je $\cos \xi = 1/a \leq 1$, tj. $0 \leq \xi_{va} \leq \pi/2$ kada je $a = 1$ i $a \rightarrow \infty$, respektivno.

Analogni zaključci važe i u slučaju kada su površinski parametri negativni, odnosno kada je interakcija na graničnim površinama oslabljena. U tom slučaju vertikalna asymptota se nalazi u intervalu $\pi/2 \leq \xi_{va} \leq \pi$.

S obzirom da je $\cosh \eta$ uvek pozitiva funkcija, jasno je da pripadna stanja sa $\rho > -2$ se mogu tražiti koristeći sledeću reprezentaciju Čebiševljevih polinoma

$$C_{n_z}(\rho) = (-1)^{n_z} \frac{\sinh[(n_z+1)\eta]}{\sinh \eta} , \quad \rho = -2 \cosh \eta , \quad \eta > 0 . \quad (1.69)$$

Zamenom (1.69) u izraz (1.29) dolazimo takođe do transcendentne jednačine za određivanje energije sistema koja je oblika

$$\coth(N_z + 2)\eta = \frac{1 + (a+b)\cosh \eta + ab \cosh 2\eta}{ab \sinh 2\eta + (a+b) \sinh \eta} , \quad \eta > 0 . \quad (1.70)$$

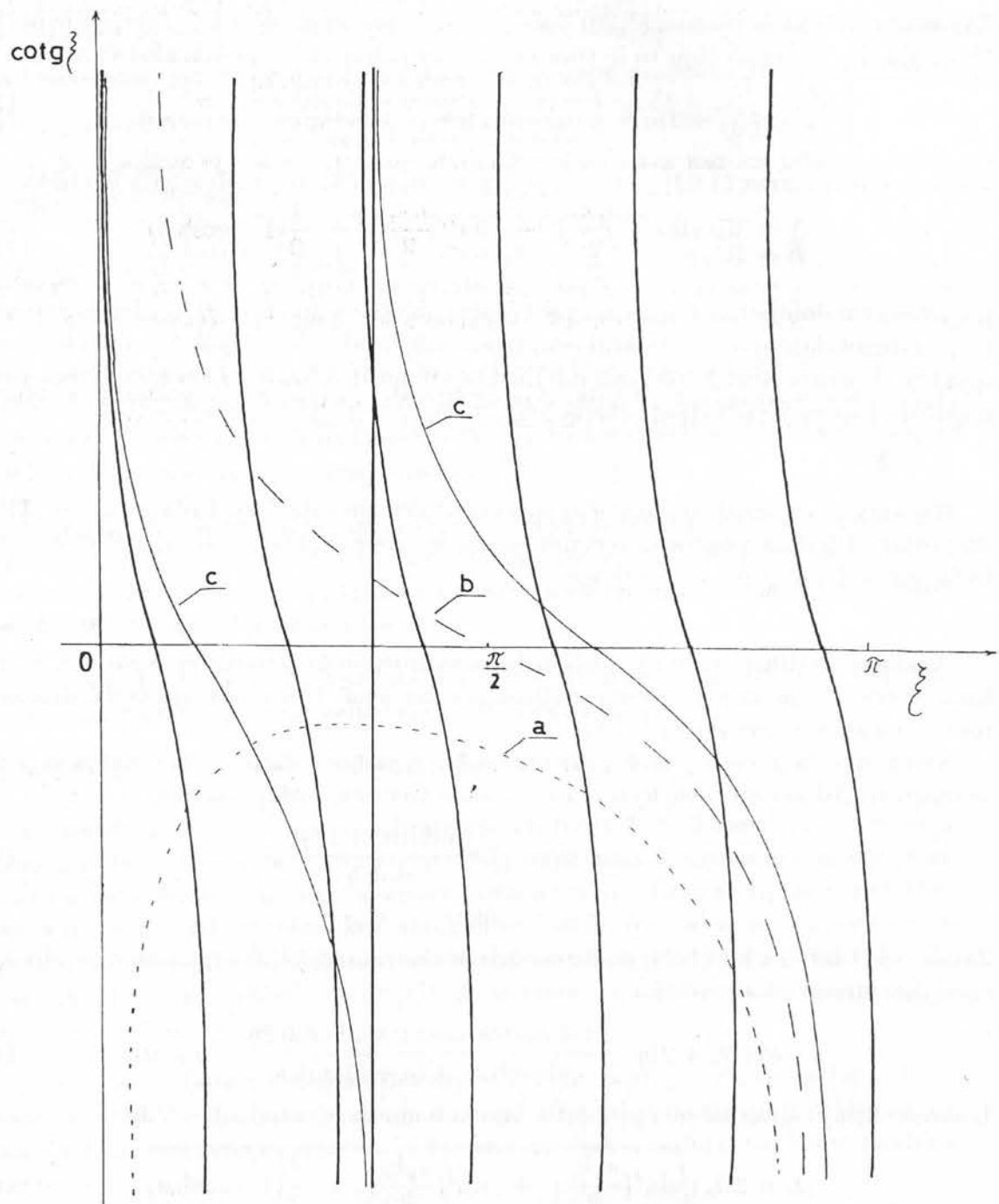
U ovom slučaju izraz za energiju datih stanja fononskog sistema je oblika:

$$E = 2\Omega_\alpha \sqrt{\sin^2\left(\frac{a_x k_x}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{a_y k_y}{2}\right) + \frac{1}{2}(1 - \cosh \eta)} . \quad (1.71)$$

Radi ilustracije razmotrimo slučaj petoslojne strukture $N_z = 4$ i $a = b$. Problem je rešen grafički. Rezultati u navedena tri karakteristična slučaja prikazani su na sl. 1.1.

⁹Postoje dve mogućnosti, $\rho > 2$ i $\rho < -2$. Posmatrajmo najpre slučaj $\rho > 2$.

¹⁰Na taj način se ne gubi na opštosti i jedino u tom slučaju (kasnije biće pokazano) se pojavljuju lokalizovana stanja uz obe granične površine, što nije slučaj kod asimetrične deformacije.



Slika 1.1. Grafičko rešenje jednačine (1.61) u slučaju petoslojne strukture ($N_z = 4$) sa sljedećim setom parametara: (a) $a = b = 0.5$, (b) $a = b = 1$ i (c) $a = b = 2.2$.

U slučaju negativnih površinskih parametara situacija je simetrična prethodnoj.

Već smo napomenuli da pored zapreminske stanje koja su ravnomerno raspoređena po celoj zapremini kristala, u strukturama kod kojih je narušena diskretna translaciona invarijantnost se mogu pojaviti i površinska fononska stanja. Prirodno je da se ta pobudjenja upravo lokalizuju na mestima gde je „prekinuta“ diskretna translaciona simetrija, tj. oko graničnih površina filma dok u unutrašnjosti strukture praktično ne postoje. Ustvari, amplitudne \mathcal{A}_{n_z} ovih stanja eksponencijalno opadaju od granične površine prema unutrašnjosti filma i date su na sledeći način [21]

$$\mathcal{A}_{n_z} = D_{n_z} e^{-n_z \eta}, \quad \eta = a\kappa > 0. \quad (1.72)$$

Formalno iz ove relacije sledi da se trže stanja čiji je talasni vektor duž z -pravca čisto imaginarni [13] ($\eta \rightarrow i\xi$, tada je očigledno $\rho = 2 \cos(i\xi) = 2 \cosh \eta$). Zbog zahteva $\eta > 0$, očigledan je fizički smisao ovog rešenja: stanja koja su lokalizovana na površini su najverovatnija jer im kvadrat modula amplitudne eksponencijalno opada sa udaljavanjem od granične površine. Otuda im i prirođan naziv.

Razmotrimo najpre kakva lokalizovana stanja treba očekivati kod filma. S obzirom da film poseduje dve granične površine, prirodno je da će i odgovarajuća pobudjenja biti lokalizovana uz njih. U tom slučaju amplitudne \mathcal{A}_{n_z} za stanja koja su lokalizovana oko graničnih površina $n_z = 0$ i $n_z = N_z$, u opštem slučaju imaju sledeći oblik

$$\mathcal{A}_{n_z} = D_0 e^{-n_z \eta} + D_N e^{-(n_z - N_z) \eta}; \quad \eta > 0, \quad (1.73)$$

s obzirom da je za $n_z = 0$ zanemariv drugi član u gornjem izrazu odnosno prvi ako je $n_z = N_z$. Posle zamene (1.73) u (1.25) nalazimo

$$\rho = -2 \cosh \eta, \quad \eta = a\kappa,$$

što nas vodi na date izraze (1.68) i (1.71) za energije površinskih stanja fononskog sistema. Zamenom (1.73) u granične jednačine (1.24) i (1.26) dolazimo do sistema jednačina za određivanje nepoznatih konstanti D_0 i D_N (uz uslov da je $e^{-N_z \eta} \approx 0$)

$$\begin{aligned} D_0(e^\eta - a) &= 0, \\ D_N(e^\eta - b) &= 0. \end{aligned} \quad (1.74)$$

Ovaj sistem, naravno dopušta više mogućnosti. Najrelevantnije su dve. Ako je $D_N = 0$ i $e^\eta = a$, tada imamo stanja lokalizovana uz površinski sloj 0. Ako je $D_0 = 0$ i $e^\eta = b$ onda su elementarna pobudjenja lokalizovana uz granični površinski sloj N_z . S obzirom da je $\eta = a\kappa > 0$, uslov egzistencije površinskih stanja je

$$\eta = \ln a \Rightarrow |a| > 1, \quad (1.75)$$

odosnosno

$$\eta = \ln b \Rightarrow |b| > 1. \quad (1.76)$$

Međutim, interesantna je mogućnost da kolektivna pobudjenja - fononi, budu lokalizovani uz oba granična sloja, a da u unutrašnjosti ne postoje. To je na osnovu (1.74)

moguće samo onda kada je $a = b = \lambda$. Tada su D_0 i D_N različiti od nule i amplitude (1.73) uz pretpostavku $D_0 = D_N \equiv D$ postaju

$$\mathcal{A}_{n_z} = D [e^{-n_z\eta} + e^{-(N_z-n_z)\eta}] ; \quad \eta = a\kappa > 0 . \quad (1.77)$$

Očigledno je da amplitude \mathcal{A}_{n_z} imaju maksimalnu vrednost D na nultom i N_z -tom sloju, dok je minimalna vrednost na sredini filma za $n_z = N_z/2$, i iznosi

$$\mathcal{A}_{N/2} = 2 D e^{-N_z\eta} \approx 0 . \quad (1.78)$$

Da bi η bilo pozitivno, mora na osnovu (1.75) i (1.76) biti $|\lambda| > 1$, što se slaže sa analizama koje slede iz transcendentne jednačine (1.61).

Prema tome u filmu se mogu pojaviti površinska stanja samo onda kada su zadovoljeni određeni uslovi, što naravno zavisi od veličine tzv. površinskih parametara a i b kao i uslova koji vladaju na granicama. Treba naglasiti da što se tiče zapreminskih stanja, ne postoje nikakva ograničenja i ova pobudjenja su uvek prisutna u sistemu.

S obzirom na simetriju koja postoji kada je ($a = b = \lambda$), dovoljno je da se ispitaju stanja oko jedne od graničnih površina. Zbog te činjenice dalje analize će biti vršene pomoću izraza (1.72), što znači da ćemo ispitivati stanja lokalizovana uz graničnu površinu za koju je $n_z = 0$, s obzirom da na graničnoj ravni $n_z = N_z$ (drugi sabirak u jednačini (1.73)) imamo identičnu fizičku sliku kao u slučaju $n_z = 0$, te je bespredmetno ispitivati rešenja tog tipa.

Rešimo sistem jednačina (1.25) da bismo našli odgovarajuće amplitude za slučaj zapreminskih stanja, a potom dijagonalizacijom hamiltonijana i odgovarajuće normirane atomske pomeraje.

Deljenjem jednačina (1.24) i (1.25) sa $\mathcal{A}_{\alpha,\nu_z,0}$, dobijamo sistem od $N + 2$ linearne jednačine po nepoznatim $\mathcal{B}_0, \mathcal{B}_1, \dots, \mathcal{B}_{N_z}$

$$\mathcal{B}_0 = 1 , \quad (1.79)$$

$$\mathcal{B}_1 + (\rho - a) = 0 , \quad n_z = 0 \quad (1.80)$$

$$\mathcal{B}_{n_z+1} + \mathcal{B}_{n_z-1} + \rho \mathcal{B}_{n_z} = 0 , \quad 1 \leq n_z \leq N_z - 1 \quad (1.81)$$

$$\mathcal{B}_{N_z-1} + (\rho - b) \mathcal{B}_{N_z} = 0 , \quad n_z = N_z \quad (1.82)$$

gde je

$$\mathcal{B}_{n_z} \equiv \mathcal{B}_{\alpha,\nu_z,n_z} = \frac{\mathcal{A}_{\alpha,\nu_z,n_z}}{\mathcal{A}_{\alpha,\nu_z,0}} . \quad (1.83)$$

Njegovo rešenje možemo dobiti standardnim postupkom za rešavanje diferencnih jednačina polazeći od jednačine (1.81) sa početnim uslovima (1.79) i (1.80). Naravno, u obzir moramo uzeti dodatni uslov (1.82) za \mathcal{B}_{N_z} koji predstavlja granični uslov za niz \mathcal{B}_{n_z} .

Analogno prethodnom slučaju, za rešenja karakteristične jednačine posmatrane rekurentne relacije (1.81) odmah možemo pisati

$$r_{1,2} = \frac{-\rho \pm \sqrt{\rho^2 - 4}}{2} . \quad (1.84)$$

Iz ove relacije je jasno da u zavisnosti od ρ imamo u opštem slučaju tri tipa mogućih rešenja za proizvoljni član niza B_{n_z} , odnosno odgovarajuće amplitude.

Kada je $|\rho| < 2$ ($r_1 \neq r_2$), tada je opšte rešenje rekurentne relacije (1.81)

$$B_{n_z} = D r_1^{n_z} + E r_2^{n_z}, \quad (1.85)$$

gde su

$$D = \frac{\rho - 2a + \sqrt{\rho^2 - 4}}{2\sqrt{\rho^2 - 4}}, \quad E = \frac{\sqrt{\rho^2 - 4} - \rho + 2a}{2\sqrt{\rho^2 - 4}}, \quad (1.86)$$

konstante odredene iz početnih uslova.

Videli smo da u slučaju $|\rho| < 2$, važi da je $\rho = 2 \cos \xi$. Tada je

$$D = \frac{1}{2}(1 - i \frac{\cos \xi - a}{\sin \xi}), \quad E = \frac{1}{2}(1 + i \frac{\cos \xi - a}{\sin \xi}), \quad (1.87)$$

što nakon zamene u (1.85) konačno za opšti član niza dobijamo

$$B_{\alpha,\nu_z,n_z} = (-1)^{n_z} \frac{\sin[(n_z + 1)\xi_\nu] - a \sin n_z \xi_\nu}{\sin \xi_\nu}. \quad (1.88)$$

S obzirom da su ξ_ν rešenja transcendentne jednačine (1.61), može se pokazati da važi

$$\sum_{n_z=0}^{N_z} B_{\alpha,\nu_z,n_z} B_{\alpha,\nu_z,n_z} = \frac{(N_z + 1)(1 - 2a \cos \xi_\nu + a^2) + 1 - a^2}{2 \sin^2 \xi_\nu}. \quad (1.89)$$

Tada za amplitude konačno možemo pisati

$$\mathcal{A}_{\alpha,\nu_z,n_z} = (-1)^{n_z} \frac{\sin[(n_z + 1)\xi_\nu] - a \sin n_z \xi_\nu}{\sin \xi_\nu} \mathcal{A}_{\alpha,\nu_z,0}. \quad (1.90)$$

Odgovarajući pomeraji su

$$u_{\alpha;n_x,n_y,n_z}(t) = (-1)^{n_z} \sum_{k_x,k_y,\nu_z} S_{\alpha;k_x,k_y,\nu_z} \mathcal{A}_{\alpha,\nu_z,0} \times$$

$$\times \{b_{\alpha;k_x,k_y,\nu_z} e^{i(n_x a_x k_x + n_y a_y k_y) - it \omega_{\alpha;k_x,k_y,\nu_z}} + h.c.\} \frac{\sin[(n_z + 1)\xi_\nu] - a \sin n_z \xi_\nu}{\sin \xi_\nu}. \quad (1.91)$$

Naravno i u ovom slučaju granična jednačina (1.82) predstavlja jednačinu za određivanje oscilatornih frekvencija u sistemu i identična je jednačini (1.29). Frekvencije $\omega_{\alpha;k_x,k_y,\nu_z}$ u gornjoj jednačini date su relacijom (1.62), a odgovarajuće ξ_ν se dobija kao rešenje transcendentne jednačine (1.61).

Diferenciranjem izraza (1.91) po vremenu i zamenom u hamiltonijan (1.2), on se svodi na dijagonalan oblik

$$H_0 = \sum_{\alpha;k_x,k_y,\nu_z} \hbar \omega_{\alpha;k_x,k_y,\nu_z} (b_{\alpha;k_x,k_y,\nu_z}^+ b_{\alpha;k_x,k_y,\nu_z} + \frac{1}{2}), \quad (1.92)$$

uz uslov da je

$$\frac{S_{\alpha;k_x,k_y,\nu_z} \mathcal{A}_{\alpha;\nu_z,0}}{\sin \xi_\nu} = \sqrt{\frac{\hbar}{MN_x N_y \mathcal{N}_z \omega_{\alpha;k_x,k_y,\nu_z}}} ,$$

gde je

$$\mathcal{N}_z = \frac{(N_z + 1)(1 - 2a \cos \xi_\nu + a^2) + 1 - a^2}{2 \sin^2 \xi_\nu} . \quad (1.93)$$

Sada možemo pisati konačan izraz za atomske pomeraje (1.91)

$$u_{\alpha;n_x,n_y,n_z}(t) = (-1)^{n_z} \sum_{k_x,k_y,\nu_z} \sqrt{\frac{\hbar}{MN_x N_y \mathcal{N}_z \omega_{\alpha;k_x,k_y,\nu_z}}} \times \\ \times \left\{ b_{\alpha;k_x,k_y,\nu_z} e^{i(n_x a_x k_x + n_y a_y k_y) - it \omega_{\alpha;k_x,k_y,\nu_z}} + h.c. \right\} \frac{\sin[(n_z + 1)\xi_\nu] - a \sin n_z \xi_\nu}{\sin \xi_\nu} . \quad (1.94)$$

U slučaju simetrične deformacije analogno (1.57), pomeraji za zapreminska stanja su dati kao kombinacija ravnih talasa u XOY ravnini i stojećih talasa u z -pravcu.

Takođe treba istaći činjenicu da frekvencija u gornjem izrazu ne može biti jednaka nuli, tako da su pomaci konačni što nije slučaj kod idealnih beskonačnih struktura u dugotalasnoj aproksimaciji (kada $k \rightarrow 0$, pomeraji postaju beskonačni tj. $u_n \rightarrow \infty$ što baš nema fizičkog smisla).

Ako je $\rho = \pm 2$, tada su koreni karakteristične jednačine jednaki (tj. $r_1 = r_2$) i opšte rešenje diferencne jednačine (1.81) je

$$B_{n_z} = (\pm 1)^{n_z} (D_1 + n_z E_1) . \quad (1.95)$$

Za konstante jednostavno dobijamo da su $D_1 = 1$ i $E_1 = 1 - a$. Granični uslov (1.82) u ovom slučaju ekvivalentan je sledećem

$$N_z(1 - a)(1 - b) = a + b - 2 , \quad (1.96)$$

što za $a \neq +1$ i $b \neq +1$ daje $N_z = \frac{a + b - 2}{(1 - a)(1 - b)}$. U slučaju $a = 1$, da bi vrednost za N_z uopšte postojala mora biti $b = 1$ i tada je N_z proizvoljno¹¹. To je u skladu sa ranije iznetim zaključcima. Analogno se nalaze amplitude i pomeraji u slučaju kada je $|\rho| > 2$, pa zbog toga ovde neće biti nadeni.

Što se tiče površinskih stanja, važno je istaći da se ona pojavljuju u sistemu kada je $|\rho| > 2$. Kako amplituda ovih stanja u skladu sa jednačinom (1.72), mora eksponenciјalno da opada, konačno možemo pisati izraz za normirane pomeraje koji dijagonalizuju hamiltonijan H_0

$$u_{n_x n_y n_z}(t) = (-1)^{n_z} \sqrt{\frac{\hbar(1 - e^{-2\eta})}{2MN_x N_y}} \sum_{k_x k_y} e^{-n_z \eta} e^{i(n_x a_x k_x + n_y a_y k_y)} (b_{k_x k_y \eta} + b_{-k_x, -k_y, \eta}^+), \quad \eta > 0 . \quad (1.97)$$

Izraz za amplitude i fononske pomeraje dobijen je pod pretpostavkom da su površinski parametri a i b pozitivni. U slučaju kada su oni negativni, odgovarajući izrazi bi ispred datih parametara jednostavno promenili znak i ovde neće biti eksplisitno navedeni.

¹¹Tačnije, za bilo koji broj slojeva N_z moguće je dobiti jedan koren za ρ koji je jednak 2 odnosno -2 ako su parametri $a = \pm 1$ i $b = \pm 1$.

1.4 Analiza fononskog praga energije

U već analiziranom zakonu disperzije (1.62), pojavljuju se veličine $\Delta_\nu^\alpha(a, b, N_z)$ koje se dobijaju kao korenji transcendentnih jednačina (1.61), (1.67) i (1.70).

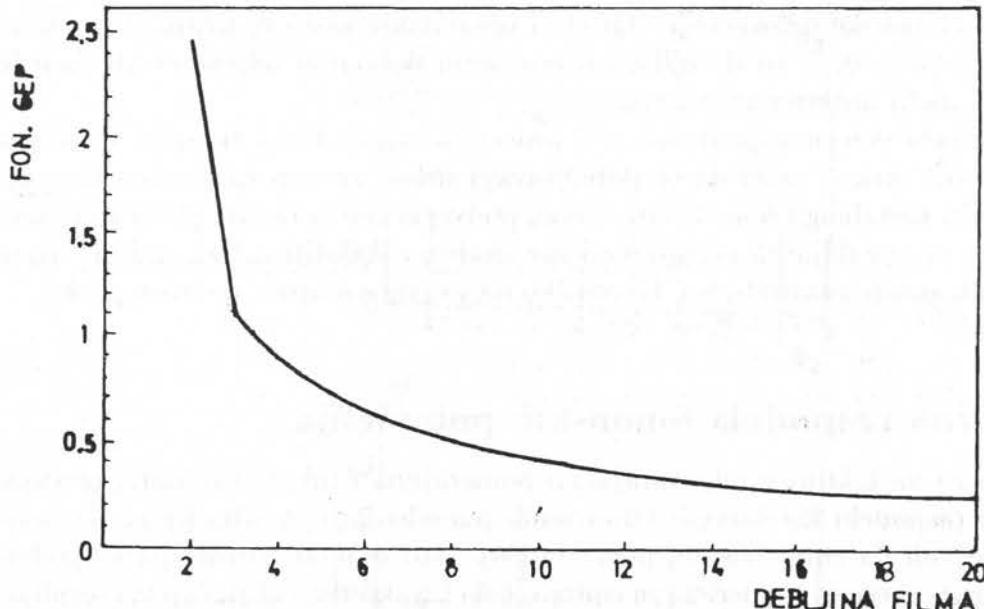
Posmatrajmo najpre slučaj kada su površinski parametri jednaki nuli, tj. $a = b = 0$. Tada je na osnovu (1.63)

$$\Delta_\nu^\alpha(0, 0, N_z) = \frac{1}{2} \left[1 + \cos\left(\frac{\pi}{N_z + 2}\nu\right) \right]; \quad \nu = 1, 2, \dots, N_z + 1, \quad (1.98)$$

što predstavlja procep u fononskom spektru (1.62) iako je kako je ranije naglašeno film „isečen“ iz proste rešetke. Ovaj procep za minimalnu vrednost talasnog vektora ($\nu = 1$), iznosi

$$\Delta_1^\alpha(0, 0, N_z) = \frac{1}{2} \left[1 + \cos\left(\frac{\pi}{N_z + 2}\right) \right]. \quad (1.99)$$

To je kako je već naglašeno, minimalna energija za pobudivanje kolektivnih oscilacija u filmu. Vidi se da je ona utoliko veća, ukoliko je film tanji. Na sl. 1.2 prikazana je zavisnost veličine fononskog praga od broja slojeva (debljine) filma.



Slika 1.2. Zavisnost veličine fononskog praga od broja slojeva pri $a = b = 0$.

Račun pokazuje što se uočava i sa priložene slike da je prag praktično jednak nuli za film od 40 – 45 slojeva.

Treba istaći da ukoliko je deformacija veća (veće vrednosti površinskih parametara), prag je nešto veći i izčezava sa povećanjem debljine otprilike na sličan način bez obzira na tip deformacije (simetričan ili asimetričan). Navedeni broj slojeva kada procep praktično izčezava treba u suštini usvojiti kao gornju granicu „stvarno“ tankog filma kod kojeg ne dolaze do izražaja efekti konačne debljine.

Povećanje parametara dovodi do toga da se u sistemu osim zapreminskih pojavljuju i površinska stanja ($|a, b| \geq 1$), za koja je karakteristično da imaju viši prag nego odgovarajuća zapreminska stanja ($|a, b| < 1$). U oba slučaja najinteresantnije pitanje sa

praktične tačke gledišta predstavlja veličina fononskog gepa u zavisnosti od površinskih parametara a i b . Sve analize pokazuju da većim vrednostima deformacionih parametara a i b , odgovaraju veće vrednosti energija aktivacije a time i više pripadne temperature pobudivanja fonona u ovim strukturama.

Ovaj zaključak je praktično važan zbog toga što ukazuje na koji način treba deformisati film da bi broj sonona u njemu bio što manji. Po svoj prilici, povećanje površinskih parametara a i b se najlakše može postići ako se film izloži jakim pritiscima na granočne površine kristala. Do ovakvog zaključka se došlo analizom kristala u kojima deluju sile Lenard-Džonsovog tipa. Potencijal ovih sila je dat sledećim izrazom (videti u [22])

$$V(r) = \frac{A}{r^{12}} - \frac{B}{r^6}, \quad (1.100)$$

gde su A i B - pozitivni koeficijenti, a r - rastojanje između atoma. Ove sile se u suštini sreću kod molekularnih kristala.

Hukova konstanta je drugi izvod potencijalne energije (1.100) u tački minimuma ($r_o = (2A/B)^{1/6}$), i data je sa $C = 36B\left(\frac{B}{2A}\right)^{4/3}$. Pod visokim pritiskom slojevi u filmu se zbližavaju. Tada r_o odnosno A opada. Kada A opada vidi se da C raste i time rastu parametri površinske deformacije. Otuda i opravdanje zašto se uzimaju pozitivni parametri ($a > 0$, $b > 0$), i to da njihovim porastom dobijamo željene efekte koji bi svakako mogli da nađu praktičnu primenu.

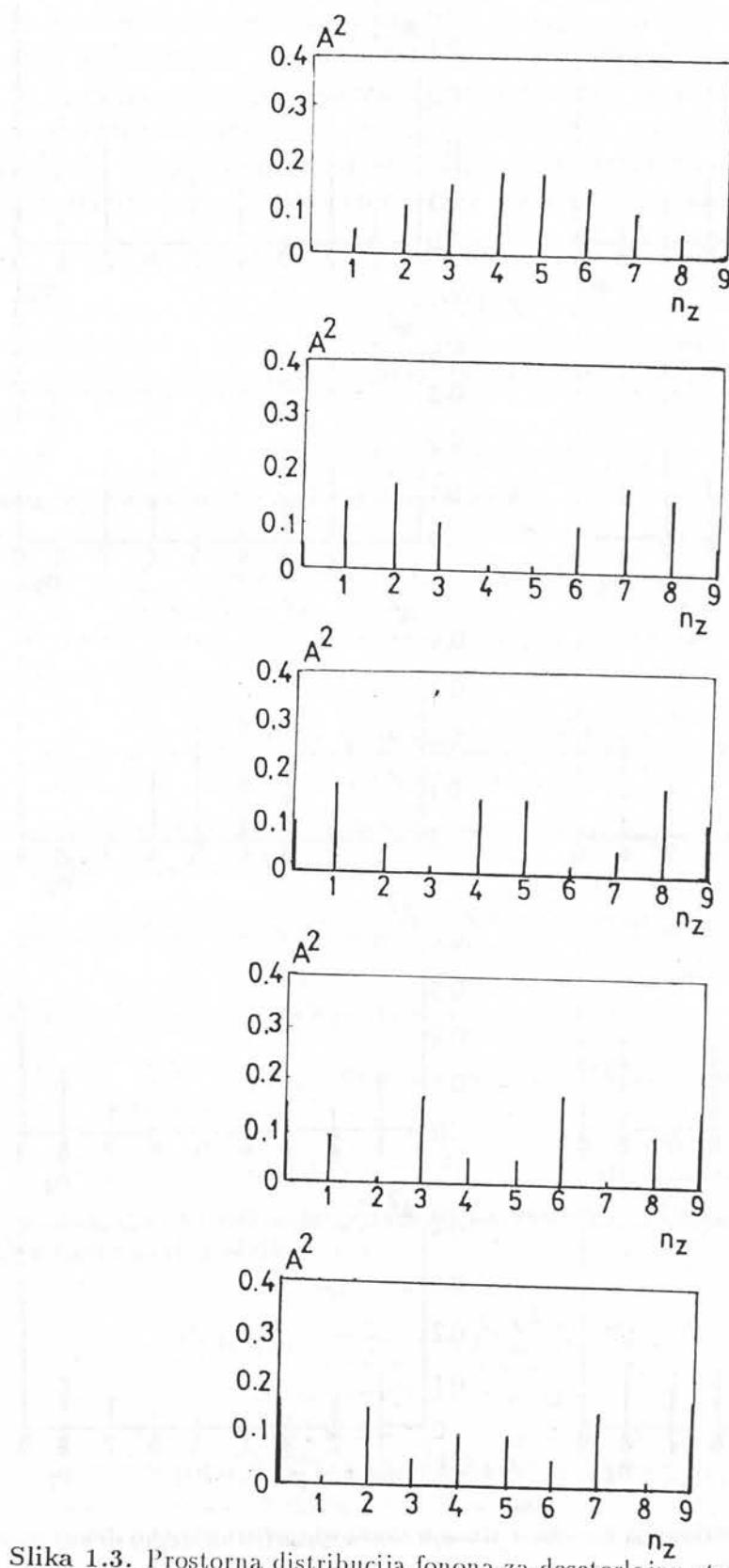
S obzirom da jača deformacija stvara veći procep, a samim tim i energiju aktivacije fonona, što sa svoje strane znači da se poboljšavaju uslovi za superprovodno kretanje elektrona u slučaju metalnog filma. Prema tome, podvrgavanjem tankih pločica visokim pritiscima mogao bi se zaključak gornje teorijske analize iskoristiti u tom smislu. To bi ne samo potvrdilo gornje rezultate već bi svakako našlo odgovarajuće mesto u praksi.

1.5 Prostorna raspodela fononskih pobuđenja

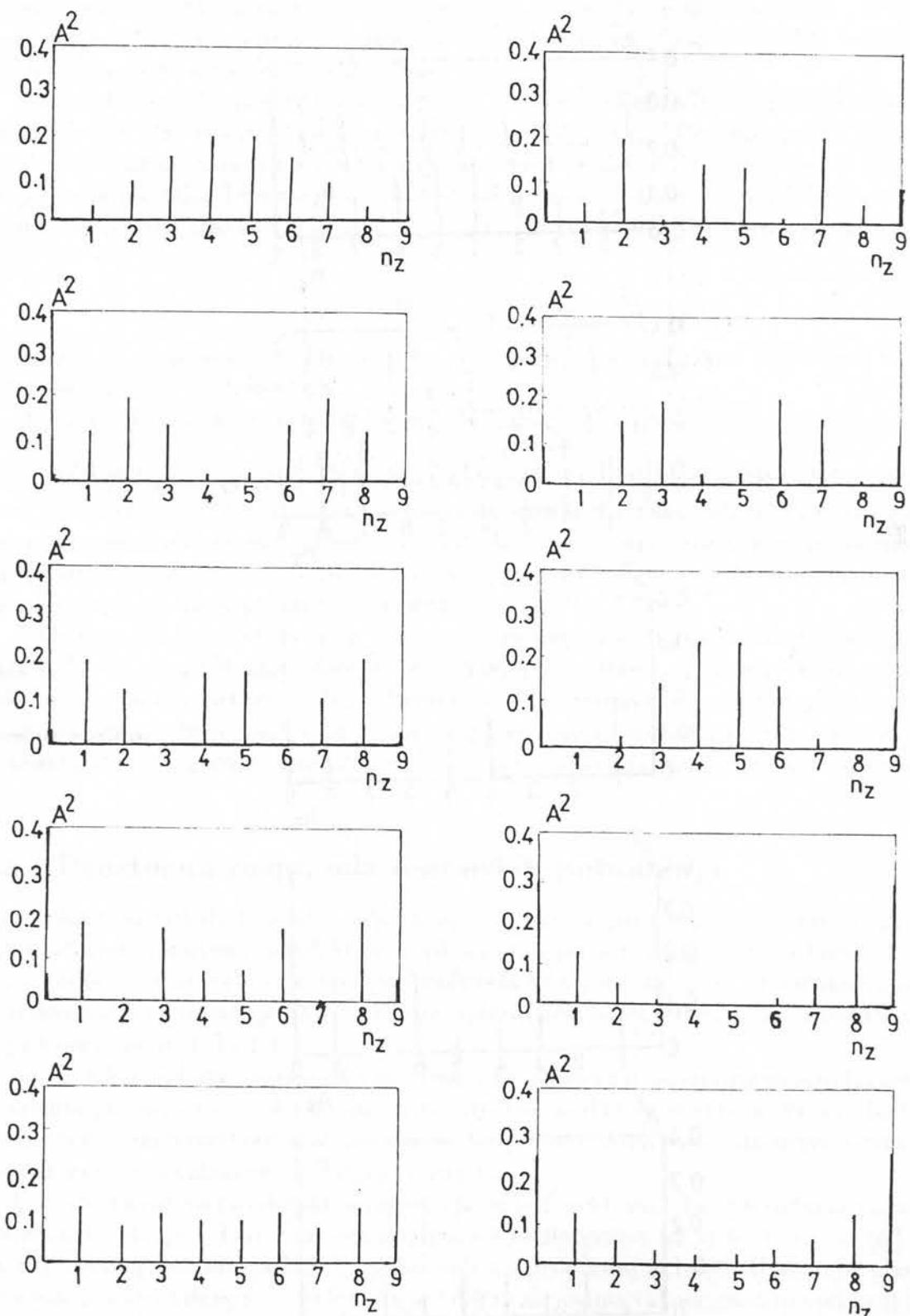
Nije teško pokazati da faktori u odgovarajućim pomerajima (njihovi kvadrati) predstavljaju prostornu raspodelu kolektivnih vibracionih pobuđenja u tankom filmu. Iz same forme funkcije se vidi da ona zavisi od položaja sloja, što znači da prostorna raspodela pobuđenja nije ravnomerna. Numerički su ispitani neki karakteristični slučajevi i rezultati su prikazani na sl. 1.3 i 1.4.

Sa sl. 1.3 se vidi da na površinskim slojevima postoji po jedan maksimum (simetrično na obema površinama - tako da su ostale simetrične slike izostavljene jer su identične). Kako se krećemo u unutrašnje slojeve filma, broj maksimuma raste, što ustvari znači veću raznovrsnost koncentracije oscilatorne energije.

U slučaju kada su površinski parametri $|a, b| > 1$, rekli smo da se u sistemu pojavljuju i površinska stanja. Tim stanjima odgovara (na slojevima $n_z = 0$ i $n_z = N_z$) oštar pik u raspodeli pobuđenja koji se jasno vidi na priloženoj sl. 1.4. U slučaju prisustva deformacije sa priložene slike se vidi da u dubljim slojevima takođe postoji veći broj mesta pojačane oscilatorne energije, dok u površinskom sloju postoje dva maksimalna pika ako je struktura deformisana simetrično. To je svakako u skladu sa diskusijom iznetoj u prethodnoj podsekciji.



Slika 1.3. Prostorna distribucija fonona za desetoslojnu strukturu i $a = b = 0$.



Slika 1.4. Prostorna distribucija fonona u slučaju desetoslojne simetrično deformisane strukture i $a = b = 1.1$.

1.6 Deformacija kao perturbacija

S obzirom da se radi o deformisanoj strukturi, izrazi za masu (1.7) i konstante elastičnosti (1.8) sadrže odgovarajuće korekcije usled dopiranja stranih atoma u osnovnu matricu. Ako su te korekcije male njih možemo da tretiramo kao perturbaciju i za analizu takvih struktura iskoristimo standardnu perturbacionu teoriju razvijenu u [7], [8] i uspešno primenjenu u [17]. Hamiltonijan interakcije H_{int} dat je jednačinom (1.16).

Radi kratkoće u pisanju određenih izraza pogodno je uvesti sledeću oznaku

$$L_{\alpha;k_x,k_y,k_z} = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\mathcal{N}_z \omega_{\alpha;k_x,k_y,k_z}}} , \quad (1.101)$$

gde je \mathcal{N}_z u slučaju zapremskih stanja dano izrazom (1.93). Takođe, lako je zaključiti da važi

$$L_{\alpha;k_x,k_y,k_z} = L_{\alpha;-k_x,-k_y,-k_z} . \quad (1.102)$$

Tada pomeraji (1.94) mogu biti zapisani u obliku

$$u_{\alpha;n_x,n_y,n_z}(t) = \sum_{k_x,k_y,k_z} \frac{L_{\alpha;k_x,k_y,k_z}}{\sqrt{N_x N_y}} \mathcal{R}_{k_z,n_z} (b_{\alpha;k_x,k_y,k_z} + b_{\alpha;-k_x,-k_y,-k_z}^+) e^{i(n_x a_x k_x + n_y a_y k_y) - it\omega_{\alpha;k_x,k_y,k_z}} \quad (1.103)$$

gde je uvedena veličina

$$\mathcal{R}_{k_z,n_z} = (-1)^{n_z} \frac{\sin[(n_z + 1)k_z a_z] - a \sin(n_z k_z a_z)}{\sin(k_z a_z)} , \quad k_z = \frac{\xi}{a_z} . \quad (1.104)$$

Diferenciranjem (1.103) po vremenu i zamenom odgovarajućih izraza u hamiltonijan interakcije (1.16) uz korišćenje relacija

$$\sum_{n_x} e^{in_x a_x (k_x + q_x)} = N_x \delta_{k_x = -q_x} ; \quad \sum_{n_y} e^{in_y a_y (k_y + q_y)} = N_y \delta_{k_y = -q_y} , \quad (1.105)$$

dolazimo do sledećeg izraza za hamiltonijan interakcije

$$H_{int} = \sum_{\alpha;k_x,k_y,k_z} L_{\alpha;k_x,k_y,k_z} L_{\alpha;k_x,k_y,q_z} \phi_{\alpha;k_x,k_y,q_z} (b_{\alpha;k_x,k_y,k_z} b_{\alpha;k_x,k_y,q_z}^+ + b_{\alpha;k_x,k_y,k_z}^+ b_{\alpha;k_x,k_y,q_z} + b_{\alpha;k_x,k_y,k_z} b_{\alpha;k_x,k_y,q_z}^+ + b_{\alpha;k_x,k_y,k_z}^+ b_{\alpha;-k_x,-k_y,q_z} + b_{\alpha;k_x,k_y,k_z} b_{\alpha;-k_x,-k_y,q_z}^+ + b_{\alpha;k_x,k_y,k_z}^+ b_{\alpha;-k_x,-k_y,q_z}^+) . \quad (1.106)$$

U funkciji $\phi_{\alpha;k_x,k_y,q_z}$ su sadržane popravke na masu μ_{n_z} i Hukove konstante elastičnosti γ_{α,n_z} . Ova funkcija ima oblik

$$\begin{aligned} \phi_{\alpha;k_x,k_y,q_z} = & -\frac{1}{2} \omega_{\alpha;k_x,k_y,k_z} \sum_{n_z=0}^{N_z} \mu_{n_z} \mathcal{R}_{k_z,n_z} \mathcal{R}_{q_z,n_z} + \\ & + 2 \left(\sin^2 \frac{k_x a_x}{2} + \sin^2 \frac{k_y a_y}{2} \right) \sum_{n_z=0}^{N_z} \gamma_{\alpha,n_z} \mathcal{R}_{k_z,n_z} \mathcal{R}_{q_z,n_z} + \\ & + \frac{1}{4} \gamma_{\alpha,0} [(\mathcal{R}_{k_z,0} - \mathcal{R}_{k_z,1})(\mathcal{R}_{q_z,0} - \mathcal{R}_{q_z,1}) + \mathcal{R}_{k_z,0} \mathcal{R}_{q_z,0}] + \end{aligned} \quad (1.107)$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{4} \gamma_{\alpha, N_z} [(\mathcal{R}_{k_z, N_z} - \mathcal{R}_{k_z, N_z-1})(\mathcal{R}_{q_z, N_z} - \mathcal{R}_{q_z, N_z-1}) + \mathcal{R}_{k_z, N_z} \mathcal{R}_{q_z, N_z}] + \\
& + \frac{1}{4} \sum_{n_z=1}^{N_z-1} \gamma_{\alpha, n_z} [(\mathcal{R}_{k_z, n_z} - \mathcal{R}_{k_z, n_z+1})(\mathcal{R}_{q_z, n_z} - \mathcal{R}_{q_z, n_z+1}) + \\
& (\mathcal{R}_{k_z, n_z} - \mathcal{R}_{k_z, n_z-1})(\mathcal{R}_{q_z, n_z} - \mathcal{R}_{q_z, n_z-1})] .
\end{aligned}$$

Prvu popravku usled deformacije dobijamo standardno kao

$$\delta E^{(1)} = \sum_{\alpha; k_x, k_y, q_z} \langle n_{\alpha; k_x, k_y, k_z} | H_{int}(\alpha; k_x, k_y, k_z, q_z) | n_{\alpha; k_x, k_y, k_z} \rangle , \quad (1.108)$$

gde su $|n_{\alpha; k_x, k_y, k_z}\rangle$ funkcije stanja sa n fonona u stanju sa talasnim vektorom k_x, k_y, k_z . One su naravno ortogonalne, tj.

$$\langle n_{\alpha; k_x, k_y, k_z} | n_{\alpha; q_x, q_y, q_z} \rangle = \delta_{k_x q_x} \delta_{k_y q_y} \delta_{k_z q_z} . \quad (1.109)$$

Nakon zamene (1.103), (1.104) i (1.107) hamiltonijan postaje dijagonalan

$$H_{int} = \sum_{\alpha; k_x, k_y, q_z} (h\omega_{\alpha; k_x, k_y, k_z} + 2L_{\alpha; k_x, k_y, k_z}^2 \phi_{\alpha; k_x, k_y, k_z}) \left(n_{\alpha; k_x, k_y, k_z} + \frac{1}{2} \right) , \quad (1.110)$$

a pripadna energija fonona je

$$E^{(1)} = \frac{\partial H_{int}}{\partial n_{\alpha; k_x, k_y, k_z}} = h\omega_{\alpha; k_x, k_y, k_z} + 2L_{\alpha; k_x, k_y, k_z}^2 \phi_{\alpha; k_x, k_y, k_z} . \quad (1.111)$$

Drugi član u ovom izrazu predstavlja popravku oscilatorne energije u odnosu na „nultu”. Standardno se može naći i druga popravka na energiju koja u ovom radu neće biti određena.

Već je više puta naglašavana i isticana činjenica postojanja energetskog procepa u fononskom spektru kod deformisanih struktura. Rečeno je da se odgovarajućom deformacijom ovih struktura u njima mogu poboljšati uslovi za superkonduktivno kretanje elektrona. U tom smislu može se govoriti o aktivacionoj energiji kao minimalnoj energiji za pobuđivanje fonona u tankim filmovima.

Na osnovu (1.62) odnosno (1.63) pripadna minimalna energija fonona u filmu je

$$\Delta_{\alpha}(N_z) = \hbar\omega_{\alpha; 0, 0, 1} = 2\hbar\Omega_{\alpha} \cos \frac{\xi_{N_z}}{2} , \quad (1.112)$$

gde je $\Omega_{\alpha} = \sqrt{C_{\alpha}/M} \sim \frac{v_{\alpha}}{a_{\alpha}}$, fononska frekvencija, v_{α} brzina zvuka u kristalu, a_{α} - konstanta reštke u odgovarajućem pravcu. Maksimalna presečna tačka ξ_{N_z} koja leži u intervalu $[(N_z + 1)/(N_z + 2)\pi, \pi]$ i koja je rešenje transcendentne jednačine (1.61), određuje minimalnu aktivacionu energiju ili njoj pripadnu aktivacionu temperaturu. Uzimajući za

$a_z \sim a_o \cdot 10^{-7} \text{ cm}$ i $v_z \sim a_o \cdot 10^5 \text{ cm/s}$, ($v_o \simeq 3.5$, $a_o \simeq 1.1$) numerički se na osnovu gornje relacije lako mogu odrediti odgovarajuće aktivacione temperature kao

$$T_{ac}(N_z) = \frac{\Delta_z(\alpha)}{k_B}. \quad (1.113)$$

Analize u [10] pokazuju analogno gepu, da odgovarajuća aktivaciona temperatura opada sa porastom broja slojeva. Ona je očigledno utoliko veća ukoliko je film tanji.

U smislu superprovodnih karakteristika jasna je konstatacija (što sledi numeričkom analizom gornje jednačine za dato jedinjenje), da filmovi imaju višu superprovodnu kritičnu temperaturu nego odgovarajuće idealne beskonačne strukture (videti u [23] i [24]). Ova eksperimentalna činjenica će biti u trećoj glavi teorijski ispitana.

1.7 Termodinamičke funkcije

Važno je istaći sledeću činjenicu da pored dinamičkih i elastičnih svojstava kristala, takođe i termodinamičke veličine su strogo korelirane sa oscilacijama atoma kristalne rešetke.

Da bismo dobili kompletniju sliku o osobinama deformisanih struktura uslovljenu uočenom promenom u zakonu disperzije, posmatraćemo ponašanje nekih relevantnih termodinamičkih veličina, kao što su unutrašnja energija, specifična toplota, slobodna energija i entropija. Posebno treba napomenuti da određivanje udela površine u specifičnu toplotu kristala osim teorijskog značaja ima i praktični interes za eksperimentatore s obzirom na činjenicu da se ta veličina može meriti.

U prvom paragrafu ove glave najinteresantniji rezultat analize je zaključak da kada $k \rightarrow 0$, energije sve tri fononske grane ostaju različite od nule. Merenje fononskog zakona disperzije kod izuzetno malog k praktično je nemoguće, pa se potvrda postojanja fononskog gepa može sagledati na primer merenjem niskotemperaturnih specifičnih toplota u filmu i u odgovarajućoj idealnoj strukturi. To će ujedno dati i odgovor na pitanje da li postoji gep u fononskom spektru tankih filmova.

U skladu sa ovim analiziraćemo specifičnu toplotu, koristeći se već dobijenim izrazom (1.62) za fononske energije u tankom filmu ($a = b = 0$) koji u dugotalasnoj aproksimaciji ima sledeći oblik

$$E(k) = \sqrt{E_0^2 a^2 k^2 + \Delta^2}, \quad (1.114)$$

gde je $E_0 = \hbar \sqrt{C_\alpha / M}$, $\Delta = \pi E_0 / (N_z + 2)$.

Najpre izračunajmo *unutrašnju energiju* koristeći standardnu formulu iz [22]

$$U_f = 3 \sum_{k_x, k_y, \mu_z} \frac{E(k)}{e^{E(k)/\theta} - 1}, \quad \theta = k_B T. \quad (1.115)$$

Nakon prelaska sa sume po k_x i k_y na integral

$$\sum_{\vec{k}, s} \rightarrow 3(N_z + 1) \sum_{k_x k_y} \rightarrow 3 \frac{N_x N_y (N_z + 1) a^2}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{k_D} k \ dk, \quad (1.116)$$

i s obzirom da je $E(k)$ dato sa (1.114) i ne zavisi od μ_z , imamo

$$U_f = 3 \frac{N_x N_y (N_z + 1) a^2}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{k_m} k \frac{\sqrt{E_0^2 a^2 k^2 + \Delta^2}}{e^{\sqrt{E_0^2 a^2 k^2 + \Delta^2}/\theta} - 1} dk,$$

što posle integracije po φ i smene $ak = x$ daje

$$U_f = \frac{3}{2\pi} N_x N_y (N_z + 1) \int_0^{ak_m} x \frac{\sqrt{E_0^2 x^2 + \Delta^2}}{e^{\sqrt{E_0^2 x^2 + \Delta^2}/\theta} - 1} dx . \quad (1.117)$$

Razvojem podintegralne funkcije u red, (1.117) reduciramo do oblika

$$U_f = \frac{3}{2\pi} N_x N_y (N_z + 1) \frac{\theta^3}{E_0^2} \sum_{j=1}^{\infty} \int_{x_1}^{x_2} x^2 e^{-jx} dx , \quad (1.118)$$

$$x_1 = \frac{\Delta}{\theta} , \quad x_2 = \frac{1}{\theta} \sqrt{E_0^2 x_m^2 + \Delta^2} ; \quad x_m = ak_m = 2\pi\sqrt{2}.$$

Kako je $x_2 \gg x_1$, udeo proporcionalan e^{-jx_2} biće zanemaren. U ovoj aproksimaciji, konačno za unutrašnju energiju filma dobijamo

$$U_f = \frac{3N_f}{2\pi} \frac{\theta^3}{E_0} \left[\frac{1}{t^2} Z_1(1/t) + 2\frac{1}{t} Z_2(1/t) + 2Z_3(1/t) \right] , \quad (1.119)$$

gde je $N_f = N_x N_y (N_z + 1)$, $1/t = \Delta/\theta$ i

$$Z_r(x) = \sum_{j=1}^{\infty} j^{-r} e^{-jx} \quad (1.120)$$

je tzv. Dajsonova funkcija [25].

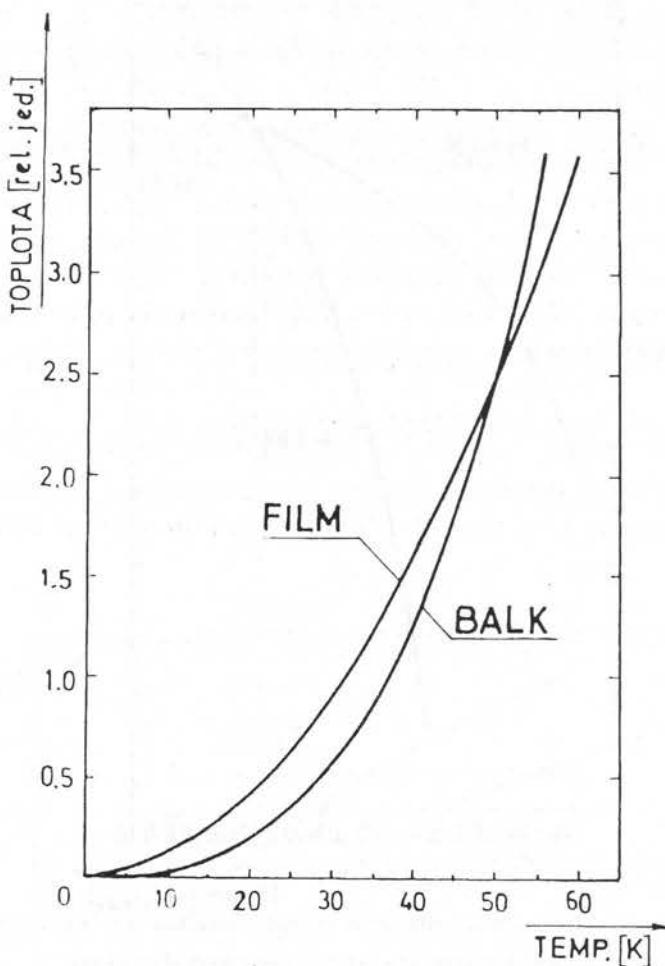
Specifična toplota po jediničnoj celiji (u jedinicama k_B) je data standardnom formulom $C_f \equiv \frac{1}{N_f} \frac{\partial U_f}{\partial \theta}$, što u našem slučaju nakon diferenciranja izraza (1.119) po θ , za specifičnu toplotu film-strukture konačno dobijamo

$$C_f = \frac{3}{2\pi} \frac{\Delta^2}{E_0^2} \left[\frac{1}{t} (e^{1/t} - 1)^{-1} + 3Z_1(1/t) + 6tZ_2(1/t) + 6t^2 Z_3(1/t) \right] . \quad (1.121)$$

Numeričke kalkulavije za C_f izvedene su u odnosu na zapreminsku specifičnu toplotu C_b sa sledećim setom parametara: $v = 3 \cdot 10^3 m/s$ i $a = 4 \cdot 10^{-10} m$. To odgovara Debajevoj temperaturi¹² $T_D = E_D/k_B \simeq 223 K$. Za film je uzeta debljina od $2 \mu m$ i to

¹²Debajeva temperatura je ona temperatura iznad koje su pobudene sve frekvencije u kristalu, tj. pobuduju se oscilacije sa frekvencijom $\omega_{max} = \omega_D$ praktično u svih atoma rešetke.

odgovara broju slojeva $N_z = 5000$. Rezultati ovih analiza su prikazani grafički na sl. 1.5.



Slika 1.5. Specifične toplove masene strukture i tankog filma u temperaturskom intervalu do $60K$.

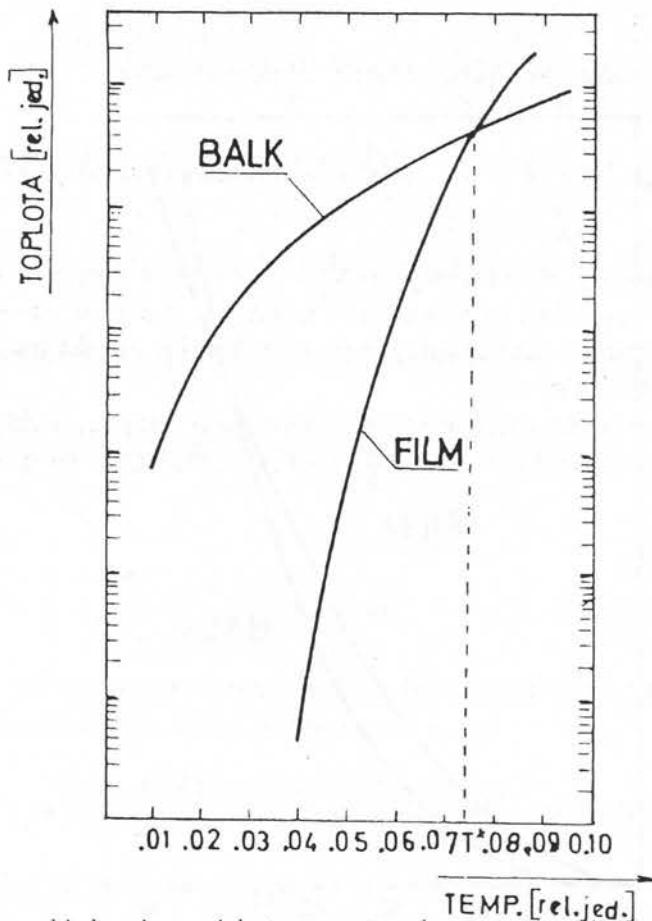
Ove analize pokazuju sledeće:

- Krive C_f i C_b imaju dve tačke preseka u temperaturskom intervalu do $60K$, i to za $T_1 = 2,2mK$ i $T_2 = 51,1K$.
- U intervalima $T < T_1$ i $T > T_2$ masena specifična toplota je viša nego specifična toplota filma, dok je $C_f > C_b$ u intervalu $T_1 < T < T_2$.

Ovaj bi rezultat mogao biti eksperimentalno dokazan s obzirom da merenja C_b u blizini temperature T_2 mogu biti relativno lako izvedena. Naravno, da eksperiment mora biti izveden na dielektričnom materijalu jer se u metalnim strukturama mogu pojaviti doprinosi specifične toplote elektrona.

Posebno zanimljivo je ispitati niskotemperatursko ponašanje specifične toplote u filmu i u odgovarajućoj idealnoj strukturi. Rezultati ovih istraživanja su dati u [26] i grafički

su predstavljeni na sl. 1.6.



Slika 1.6. Fononski doprinos niskotemperaturskom ponašanju specifične toploće u tankom filmu i odgovarajućoj masivnoj strukturi.

Sa grafika se vidi da specifična toploća u filmu sa sniženjem temperature brže (eksponeñijalno) opada nego u odgovarajućoj idealnoj strukturi: $C_i \sim T^3$, $C_f \sim T^{-1} \exp(-c/T)$, ili sporije raste sa povećanjem temperature (sve do temperature T^*), pa se može zaključiti da je zagrevanje filma relativno teže nego zagrevanje odgovarajuće idealne strukture.

To je u skladu sa rezultatima u [27]-[29], gde se ističe da aktivacioni karakter spektra pri računanju specifične toploće, dovodi do eksponencijalno malih popravki u blizini absolutne nule (odnosno na niskim temperaturama), za razliku od stepenih temperaturnih zakona koji se javljaju u balku. To drugim rečima znači da je za zagrevanje filma potrebno utrošiti mnogo veću topločnu energiju, odakle sledi da je energija pobuđenja fonona u filmu veća od odgovarajuće u idealnoj masivnoj strukturi.

U okviru navedenog rada [26] a takođe i u [30], izračunata je *slobodna energija* posmatranog sistema koristeći relaciju

$$F = \theta \sum_{\vec{k}, s} \ln \left[1 - e^{\hbar \omega_s(\vec{k})/\theta} \right]. \quad (1.122)$$

Zamenom zakona disperzije (1.114) i standardnim prelaskom sa sume na integral te posle

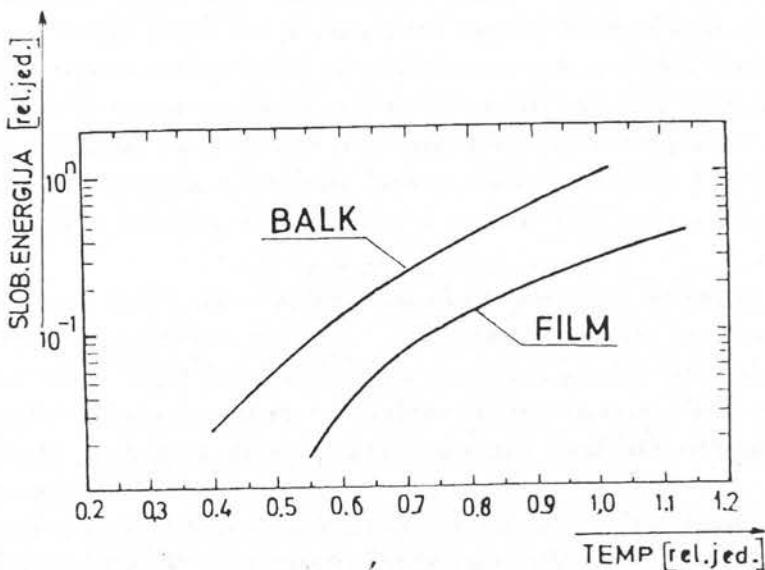
integracije po φ (i smene $ak = x$) dobijamo

$$F_f = \frac{3}{2\pi} N_x N_y (N_z + 1) \theta \int_0^{ak_D} x \ln \left[1 - e^{-\frac{1}{\theta} \sqrt{E_0 x^2 + \Delta^2}} \right] dx . \quad (1.123)$$

Nakon sličnih aproksimacija konačno možemo pisati izraz za slobodnu energiju (po jediničnojćeliji) za film - strukture

$$\begin{aligned} F_f = & \frac{3}{4\pi} \theta \frac{\Delta^2}{E_0^2} \left[\delta \ln \left(1 - e^{-1/\theta\sqrt{\delta}} \right) - \right. \\ & \left. - \ln \left(1 - e^{-1/\theta} \right) - Z_1(1/\theta) + 2tZ_2(1/\theta) + 2t^2Z_3(1/\theta) \right] , \end{aligned} \quad (1.124)$$

gde je $E_D = E_0 ak_D$, $ak_D = \sqrt[3]{6\pi^2}$ i $\delta = 1 + \frac{E_D^2}{\Delta^2}$. Niskotemperatursko ponašanje slobodne energije u filmu i odgovarajućoj idealnoj strukturi je predstavljeno na sl. 1.7.



Slika 1.7. Fononski doprinos niskotemperaturskom ponašanju slobodne energije u tankom filmu i odgovarajućoj idealnoj zapreminskej strukturi.

Sa grafika se vidi da slobodna energija brže opada sa sniženjem temperature u filmu, nego u odgovarajućoj idealnoj strukturi, ($F_i \sim T^4$, $F_f \sim T \exp(-const/T)$) ili sporije raste sa povećanjem temperature.

Dalje, da bismo izveli neke kvalitativnije zaključke o termodinamičkoj uređenosti sistema, posmatraćemo ponašanje entropije $S = -\partial F / \partial \theta$ (izražene u jedinicama k_B). Primjenjujući parcijalno diferenciranje na (1.124) dobija se (vidi [26]) sledeći izraz

$$\begin{aligned} S_f = & \frac{3}{4\pi} \frac{\Delta^2}{E_0^2} \left[\frac{1}{t} \delta \left(e^{1/\theta\sqrt{\delta}} - 1 \right)^{-1} + \ln \left(1 - e^{-1/\theta} \right) - \right. \\ & \left. - \delta \ln \left(1 - e^{-1/\theta\sqrt{\delta}} \right) - Z_1(1/\theta) - 6tZ_2(1/\theta) - 6t^2Z_3(1/\theta) \right] . \end{aligned} \quad (1.125)$$

Grafički prikaz niskotemperaturskog ponašanja entropije tankog filma i idealnog beskonačnog kristala potpuno je analogan ponašanju specifičnih toplota ovih sistema koje su prikazane na slikama 1.5 i 1.6, te ovde neće biti posebno dati.

Polazeći od ovakvih oblika krivih, lako je uočiti da entropija sa sniženjem temperature, brže opada u filmu nego u odgovarajućoj idealnoj strukturi ($S_i \sim T^3$, a $S_f \sim T^{-1} \exp(-\text{const}/T)$), odnosno da sporije raste sa povećanjem temperature (sve do temperature T^*). Kako je entropija mera uredenosti stanja sistema, a na dатој temperaturi entropija ograničene strukture manja je od entropije odgovarajuće neograničene, može se izvesti zaključak da film predstavlja uređeniji termodinamički sistem od idealne zapreminske strukture.

Glava II

2 Elektronska stanja u tankim dopiranim filmovima

Narušena simetrija koje je uslovljena postojanjem granica kod kristalnih film-struktura dovodi do pojave novih i savršeno neočekivanih svojstava. Zbog toga je interes za njihovo izučavanje veoma porastao poslednjih godina [32] i u toj oblasti skoncentrisan je ceo kompleks problema koji imaju duboki kako teorijski, tako i praktični aspekt.

Intenzivnija istraživanja ove vrste su usledila nakon sintetizovanja novih perovskitskih materijala koji pogodnim spaterovanjem postaju visokotemperaturski superprovodnici. Unutrašnja struktura ovih materijala je takva da su atomi smešteni po slojevima. Zbog toga se može pretpostaviti da se realni keramički sistemi mogu razmatrati kao strukture koje su podeljene na blokove slojeva na takav način da formiraju sistem tankih spaterovanih filmova koji se sastoje od nekoliko slojeva. Sa teorijske tačke gledišta, ne postoji razlika između tih blokova („sendviča“) koji se sastoje od određenog broja slojeva i tankih filmova. Treba istaći da je struktura tankih filmova koji će se ovde teorijski razmatrati veoma prosta u poređenju sa strukturom spaterovanih keramika. Međutim, i pored te pretpostavke mogu se dobiti neki interesantni i korisni rezultati.

Pre nego što predemo na elektrone u tankim filmovima, neophodno je ukratko se osvrnuti na ponašanje elektrona u idealnim beskonačnim kristalima [11]-[13], [31]. Prilikom sjedinjavanja atoma u kristalu, elektronima u atomu stoje na raspolažanju sledeće dve mogućnosti.

Valentni elektroni mogu da se kolektiviziraju i relativno slobodno kreću po kristalu u polju regularno rasporedenih jona, tj. u kristalnoj rešetki koja poseduje diskretnu translacionu simetriju. Dejstvo periodičnog potencijala jonskih ostataka (rešetke) dovodi do toga da energija elektrona poprima odredene vrednosti, koje obrazuju tzv. energetsku zonu, što nas vodi na zonsku sliku. U ovom slučaju govorimo o *Blobovim stanjima* ili *Blobovim elektronima*¹³.

Druge moguće stanje elektrona u kristalu - kada su oni (lokализovani na atomu) jako vezani sa svojim atomima¹⁴ i sve vreme kruže oko njih ne prelazeći na susedne atome. Pripadna stanja su u ovom slučaju izražena preko tzv. *Vanijeovih funkcija*.

Ove funkcije su vezane za \vec{R} -ti atom (u n -toj zoni) i grade se u vidu linearne superpozicije blobovskih funkcija

$$\phi_n(\vec{r} - \vec{R}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} u_{\vec{k}}^{(n)}(\vec{r}) e^{i\vec{k}(\vec{r}-\vec{R})}. \quad (2.1)$$

Inverzna transformacija omogućava da se svojstvene funkcije u ovom slučaju izraze

¹³Sva svojstva čvrstog tela u ovom slučaju zavise od odnosa između broja elektrona i broja slobodnih stanja u zonama.

¹⁴U literaturi poznat kao *Metod jake veze* ili u hemiji pod nazivom metoda *linearne kombinacije atomske orbitala*. Njegova ideja se zasniva na tome da su poznate talasne funkcije (atomske orbitalne) i energije izolovanog atoma. Talasne funkcije sistema su date u vidu linearne kombinacije atomske orbitala centriranih na izolovanim atomima. Međutim, zbog konačnog prekrivanja talasnih funkcija one nisu međusobno ortogonalne jedna na drugu. Te teškoće je moguće izbeći uzimajući nužnu linearnu kombinaciju atomske orbitala različitih atoma tako da bi integrali prekrivanja težili u nulu. Sistematski metod dobijanja toga rezultata je - metod Vanijeovih funkcija.

preko Vanijeovih funkcija

$$\psi_k^{(n)}(\vec{r} - \vec{R}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}} \phi_n(\vec{r} - \vec{R}) e^{i\vec{k}\vec{R}} . \quad (2.2)$$

Ovaj izraz ima formu talasne funkcije u aproksimaciji jake veze gde $\phi_n(\vec{r} - \vec{R})$ igraju ulogu atomskih talasnih funkcija. Međutim, za razliku od atomskih talasnih funkcija (u aproksimaciji jake veze) takva rešenja su tačna i prema tome uzajamno ortogonalna, tj.

$$\int d\tau \phi_n^*(\vec{r} - \vec{R}) \phi_m(\vec{r} - \vec{R}') = \delta_{nm} \delta_{\vec{R}\vec{R}'} . \quad (2.3)$$

Vanijeove funkcije su lokalizovane ali ne toliko jako kao atomske funkcije. Činjenica da su Vanijeove funkcije na različitim čvorovima ortogonalne dovodi do zaključka da one moraju oscilovati u području prekrivanja - jedino u tom slučaju gornji integrali tipa (2.3) mogu izčezavati.

2.1 Elektronski hamiltonijan filma. Fizički model

Ovde će biti razmatran uticaj površine kristala na zakon disperzije i stanja elektronskog sistema u tankom filmu. Uračunavanje površina je moguće po šemi „odrezanog“ kristala (tankog filma) kako je to u literaturi uobičajeno [17], [20].

Razmotrimo radi jednostavnosti tetragonalni kristal sa konstantama rešetke a_x, a_y i a_z i sa jednim atomom po elementarnoj celiji. Takođe prepostavimo da je naš posmatrani tanki film beskonačan duž X i Y pravca, a duž z -ose se sastoji od N_z atomskih (molekularnih) slojeva koji je relativno mali. Osim toga, prepostavimo da se naš razmatrani kristal sastoji od atoma koji imaju po jedan elektron što drugim rečima znači da mi imamo najviše jedan elektron (ili šupljinu) po čvoru. Takođe, smatraćemo da su matrični elementi prelaza u graničnim slojevima promenjeni u odnosu na njihove vrednosti koje imaju u unutrašnjosti filma.

Ispitajmo moguće vrednosti energije elektronskih stanja ovakvog kristala pretpostavljajući da su atomi (molekuli) locirani na čvorovima rešetke $\vec{n} = \sum_i n_i \vec{a}_i$ (gde su n_i -celi brojevi). Takođe za sada zanemarimo oscilatorne stepene slobode. Indeksi čvorova n_x i n_y se menjaju u intervalu

$$-\frac{N_x}{2} \leq n_x \leq \frac{N_x}{2} \quad ; \quad -\frac{N_y}{2} \leq n_y \leq \frac{N_y}{2} . \quad (2.4)$$

Duž ova dva ravnopravna pravca su nametnuti simetrični granični (Born-Karmanovi) uslovi. Broj molekula duž z -pravca je konačan i menja se u intervalu

$$n_z \in [0, N_z] , \quad N_x, N_y \gg N_z . \quad (2.5)$$

S obzirom da je duž z -pravca sistem konačne debljine, prirodno se nameće uslov da slojevi za koje je $n_z \leq -1$ i $n_z \geq N_z + 1$ ne postoje, kao i da su odgovarajuće elektronske talasne funkcije jednake nuli. Površine koje nastaju na taj način za $n_z = 0$

i $n_z = N_z$, predstavljaju oštar prelaz između stroge periodičnosti rešetke i vakuma. Površina kristala u suštini predstavlja dvodimenzionalni defekt. U okolini takvih defekata (graničnih ili površinskih ravnih) kristala mogu se pojaviti specifična elektronska stanja, poznata kao *Tamm-ova ili površinska stanja* [33]¹⁵. Ta stanja će u slučaju tankih filmova biti detaljno analizirana u podsekcijama koje predstoje.

U modelu se posmatra kristal sa fiksiranom rešetkom. Harmonijski elektronski hamiltonijan¹⁶ [34] može biti zapisan preko Fermi-operatora kreacije $a_{\vec{n}}^+$ ($a_{\vec{n}}$) (anihilacije) elektrona na čvoru \vec{n} u Vanijeovoj reprezentaciji

$$H = \sum_{\vec{n}\vec{m}} W_{\vec{n}\vec{m}} a_{\vec{n}}^+ a_{\vec{m}} - \sum_{\vec{n}\vec{m}} W_{\vec{n}\vec{m}} a_{\vec{n}}^+ a_{\vec{m}}, \quad (2.6)$$

gde su $W_{\vec{n}\vec{m}}$ - integrali koji odgovaraju prelazima između stanja lokalizovanih na čvorovima \vec{n} i \vec{m} . Operatori $a_{\vec{n}}^+$ ($a_{\vec{n}}$) zadovoljavaju antikomutacione relacije tj.

$$\{a_{\vec{n}}, a_{\vec{m}}^+\} = \delta_{\vec{n}\vec{m}}, \quad \{a_{\vec{n}}, a_{\vec{m}}\} = \{a_{\vec{n}}^+, a_{\vec{m}}^+\} = 0. \quad (2.7)$$

Gornji hamiltonijan je napisan u formi koja je neuobičajena i kao takva se ne sreće u literaturi. Međutim, ona je pogodna zbog toga što zakon disperzije koji sledi iz hamiltonijana zapisanog na ovaj način u dugotalasnoj aproksimaciji ne sadrži (gep) aditivni deo. Ovaj hamiltonijan je napisan za balk, međutim može se koristiti prilikom analiza struktura kod kojih je narušena translaciona invarijantnost.

Eksplisitno, u aproksimaciji najbližih suseda hamiltonijan (2.6) se može napisati u obliku

$$\begin{aligned} H = & \sum_{n_x n_y n_z} [W_{n_x, n_y, n_z; n_x+1, n_y, n_z} + W_{n_x, n_y, n_z; n_x-1, n_y, n_z} + \\ & + W_{n_x, n_y, n_z; n_x, n_y+1, n_z} + W_{n_x, n_y, n_z; n_x, n_y-1, n_z} + \\ & + W_{n_x, n_y, n_z; n_x, n_y, n_z+1} + W_{n_x, n_y, n_z; n_x, n_y, n_z-1}] a_{n_x n_y n_z}^+ a_{n_x n_y n_z} - \\ & - \sum_{n_x n_y n_z} a_{n_x n_y n_z}^+ [W_{n_x, n_y, n_z; n_x+1, n_y, n_z} a_{n_x+1, n_y, n_z} + W_{n_x, n_y, n_z; n_x-1, n_y, n_z} a_{n_x-1, n_y, n_z} + \\ & + W_{n_x, n_y, n_z; n_x, n_y+1, n_z} a_{n_x, n_y+1, n_z} + W_{n_x, n_y, n_z; n_x, n_y-1, n_z} a_{n_x, n_y-1, n_z} + \\ & + W_{n_x, n_y, n_z; n_x, n_y, n_z+1} a_{n_x, n_y, n_z+1} + W_{n_x, n_y, n_z; n_x, n_y, n_z-1} a_{n_x, n_y, n_z-1}]. \end{aligned} \quad (2.8)$$

Ovako napisan hamiltonijan važi za balk tako da gornji matrični elementi prelaza imaju samo vrednosti W_x , W_y i W_z . Međutim, u slučaju opisanog filma kod koga se interakcije W na granicama menjaju¹⁷ važi [35]

$$W_{n, n \pm \lambda_x} = \begin{cases} W_x & ; \quad 1 \leq n_z \leq N_z - 1 \\ W_x + \alpha_0 & ; \quad n_z = 0 \\ W_x + \alpha_N & ; \quad n_z = N_z \end{cases} \quad (2.9)$$

¹⁵Još 1932. godine, I.M.Tamm je u svom teorijskom radu „O mogućoj vezi elektrona na površini kristala”, pokazao da elektroni mogu biti povezani sa površinom čvrstog tela, premeštajući se samo duž nje. Ova elektronska površinska stanja, poznata još kao *Tamm-ova stanja*, leže u osnovi radova koji se bave nizom svojstava u čvrstom stanju. Po svojoj prirodi oni umnogome liče na obična vezana stanja, koja se izučavaju u običnim kursevima kvantne mehanike.

¹⁶On se javlja kao specijalan slučaj Habardovog hamiltonijana u tzv. *zonskoj granici* kada je $U \ll W$, gde je U kulonovo odbijanje dva elektrona na istom čvoru.

¹⁷Postojanje površinskih stanja upravo se obezbeđuje razlikom matričnog elementa W_s na površini i između graničnog i prvog sloja od njegove vrednosti W u dubini kristala.

$$W_{n,n \pm \lambda_y} = \begin{cases} W_y & ; \quad 1 \leq n_z \leq N_z - 1 \\ W_y + \beta_0 & ; \quad n_z = 0 \\ W_y + \beta_N & ; \quad n_z = N_z \end{cases} \quad (2.10)$$

$$W_{n,n \pm \lambda_z} = \begin{cases} W_z & ; \quad 1 \leq n_z \leq N_z - 1 \\ W_z + \gamma_0 & ; \quad n_z = 0 \\ W_z + \gamma_N & ; \quad n_z = N_z \end{cases} \quad (2.11)$$

pri čemu su uvedene sledeće označke

$$\begin{aligned} j &= x, y, z; \quad n = (n_x, n_y, n_z) \\ n \pm \lambda_x &\equiv (n_x \pm 1, n_y, n_z) \\ n \pm \lambda_y &\equiv (n_x, n_y \pm 1, n_z) \\ n \pm \lambda_z &\equiv (n_x, n_y, n_z \pm 1). \end{aligned} \quad (2.12)$$

U skladu sa rečenim, odgovarajući matrični elementi moraju izčezavati tj. možemo eksplicitno pisati

$$\begin{aligned} W_{n_x, n_y, 0; n_x+1, n_y, -1} &= W_{n_x, n_y, 0; n_x-1, n_y, -1} = 0 \\ W_{n_x, n_y, 0; n_x, n_y+1, -1} &= W_{n_x, n_y, 0; n_x, n_y-1, -1} = 0 \\ W_{n_x, n_y, N_z; n_x+1, n_y, N_z+1} &= W_{n_x, n_y, N_z; n_x-1, n_y, N_z+1} = 0 \\ W_{n_x, n_y, N_z; n_x, n_y+1, N_z+1} &= W_{n_x, n_y, N_z; n_x, n_y-1, N_z+1} = 0. \end{aligned} \quad (2.13)$$

U jednačinama (2.9) do (2.11) uvedene popravke α_0 (α_{N_z}), β_0 (β_{N_z}), γ_0 (γ_{N_z}), predstavljaju tzv. površinske parametre. Svi ostali integrali preskoka $W_{n_x, n_y, n_z; m_x, m_y, m_z}$ su međusobno jednak i biće u aproksimaciji najблиžih suseda obeleženi sa $W_{n_x, n_y, n_z; n_x \pm 1, n_y, n_z} \equiv W_x$, $W_{n_x, n_y, n_z; n_x, n_y \pm 1, n_z} \equiv W_y$ i $W_{n_x, n_y, n_z; n_x, n_y, n_z \pm 1} \equiv W_z$.

Imajući u vidu relacije (2.9), (2.10) i (2.11), hamiltonijan (2.8) može biti napisan na sledeći način

$$H = H_S + H_B, \quad (2.14)$$

gde je

$$\begin{aligned} H_S &= \sum_{n_x n_y} (2W_x + 2W_y + W_z + 2\alpha_0 + 2\beta_0 + \gamma_0) a_{n_x, n_y, 0}^+ a_{n_x, n_y, 0} + \\ &\quad \sum_{n_x n_y} (2W_x + 2W_y + 2W_z + \gamma_0) a_{n_x, n_y, 1}^+ a_{n_x, n_y, 1} - \\ &\quad - \sum_{n_x n_y} [(W_x + \alpha_0) a_{n_x n_y 0}^+ a_{n_x+1 n_y 0} + (W_x + \alpha_0) a_{n_x n_y 0}^+ a_{n_x-1 n_y 0} + \\ &\quad + (W_y + \beta_0) a_{n_x n_y 0}^+ a_{n_x n_y+1, 0} + (W_y + \beta_0) a_{n_x n_y 0}^+ a_{n_x n_y-1, 0} + \\ &\quad + (W_z + \gamma_0) a_{n_x n_y 0}^+ a_{n_x n_y, 1}] - \\ &\quad - \sum_{n_x n_y} [W_x a_{n_x n_y 1}^+ a_{n_x+1 n_y 1} + W_x a_{n_x n_y 1}^+ a_{n_x-1 n_y 1} + \\ &\quad + W_y a_{n_x n_y 1}^+ a_{n_x n_y+1, 1} + W_y a_{n_x n_y 1}^+ a_{n_x n_y-1, 1} + \dots] \end{aligned} \quad (2.15)$$

$$\begin{aligned}
& + W_z a_{n_x n_y 1}^+ a_{n_x n_y, 2} + (W_z + \gamma_0) a_{n_x n_y 1}^+ a_{n_x n_y, 0}] + \\
& + \sum_{n_x n_y} (2W_x + 2W_y + W_z + 2\alpha_{N_z} + 2\beta_{N_z} + \gamma_{N_z}) a_{n_x, n_y, N_z}^+ a_{n_x, n_y, N_z} + \\
& + \sum_{n_x n_y} (2W_x + 2W_y + 2W_z + \gamma_{N_z}) a_{n_x, n_y, N_z - 1}^+ a_{n_x, n_y, N_z - 1} - \\
& - \sum_{n_x n_y} [(W_x + \alpha_{N_z}) a_{n_x n_y N_z}^+ a_{n_x + 1 n_y N_z} + (W_x + \alpha_{N_z}) a_{n_x n_y N_z}^+ a_{n_x - 1 n_y N_z} + \\
& + (W_y + \beta_{N_z}) a_{n_x n_y N_z}^+ a_{n_x n_y + 1, N_z} + (W_y + \beta_{N_z}) a_{n_x n_y N_z}^+ a_{n_x n_y - 1, N_z} + \\
& + (W_z + \gamma_{N_z}) a_{n_x n_y N_z}^+ a_{n_x n_y, N_z - 1}] - \\
& - \sum_{n_x n_y} [W_x a_{n_x n_y N_z - 1}^+ a_{n_x + 1 n_y N_z - 1} + W_x a_{n_x n_y N_z - 1}^+ a_{n_x - 1 n_y N_z - 1} + \\
& + W_y a_{n_x n_y N_z - 1}^+ a_{n_x n_y + 1, N_z - 1} + W_y a_{n_x n_y N_z - 1}^+ a_{n_x n_y - 1, N_z - 1} + \\
& + W_z a_{n_x n_y N_z - 1}^+ a_{n_x n_y, N_z - 2} + (W_z + \gamma_{N_z}) a_{n_x n_y N_z - 1}^+ a_{n_x n_y, N_z}]
\end{aligned}$$

i

$$\begin{aligned}
H_B = & \sum_{n_x n_y} \sum_{n_z=2}^{N_z-2} (2W_x + 2W_y + 2W_z) a_{n_x n_y n_z}^+ a_{n_x n_y, n_z} - \\
& - \sum_{n_x n_y} \sum_{n_z=2}^{N_z-2} a_{n_x n_y n_z}^+ (W_x a_{n_x + 1 n_y n_z} + W_x a_{n_x - 1 n_y n_z} + W_y a_{n_x n_y + 1, n_z} + \\
& + W_y a_{n_x n_y - 1, n_z} + W_z a_{n_x n_y, n_z + 1} + W_z a_{n_x n_y n_z - 1}) , \tag{2.16}
\end{aligned}$$

H_S - je hamiltonijan površinskog sistema, a H_B - unutrašnjosti filma.

Analizu ovog hamiltonijana izvršićemo pomoću jednoelektronske talasne funkcije $|\Psi_1\rangle$. Ako talasnu funkciju osnovnog stanja označimo sa $|0\rangle$, tada stanja sa jednim elektronom koja nas interesuju možemo predstaviti u vidu linearne kombinacije

$$|\Psi_1\rangle = \sum_{n_x, n_y, n_z} A_{n_x n_y n_z} a_{n_x n_y n_z}^+ |0\rangle , \tag{2.17}$$

gde veličine $A_{n_x n_y n_z}$ imaju smisao amplituda verovatnoće u koordinatnoj reprezentaciji da se elektron u aktu merenja registruje na čvoru \vec{n} . Kvadrati modula koeficijenata $A_{\vec{n}}$, daju prostornu raspodelu elektrona.

S obzirom da je talasna funkcija (2.17) normirana $\langle \Psi_1 | \Psi_1 \rangle = 1$, jasno sledi da je

$$\sum_{n_x, n_y, n_z} A_{n_x n_y n_z}^* A_{n_x n_y n_z} = 1 . \tag{2.18}$$

Jednoelektronska talasna funkcija (2.17) treba da zadovoljava Šredingerovu jednačinu

$$H |\Psi_1\rangle = E_1 |\Psi_1\rangle , \tag{2.19}$$

gde je E_1 -tražena energija kristala sa jednim elektronom. Neka je

$$H |0\rangle = E_0 |0\rangle , \tag{2.20}$$

gde je E_0 energija osnovnog stanja.

Ako gornju jednačinu pomnožimo sa $A_{n_x n_y n_z} a_{n_x n_y n_z}^+$ i potom prosumiramo po \vec{n} , dobijamo

$$\sum_{n_x, n_y, n_z} A_{n_x n_y n_z} a_{n_x n_y n_z}^+ H |0\rangle = E_0 \sum_{n_x, n_y, n_z} A_{n_x n_y n_z} a_{n_x n_y n_z}^+ |0\rangle = E_0 |\Psi_1\rangle. \quad (2.21)$$

Korišćenjem komutatora $[a_{\vec{n}}, H]$ tada možemo pisati

$$E a_{n_x, n_y, n_z}^+ + [a_{n_x, n_y, n_z}^+, H] = 0, \quad E = E_1 - E_0 = \hbar\omega, \quad (2.22)$$

jednačinu za nepoznate amplitude, što je ustvari Hajzenbergova jednačina za operator a_{n_x, n_y, n_z}^+ uz $a_{n_x, n_y, n_z}^+(t) = e^{iEt} a_{n_x, n_y, n_z}^+$.

Pošto je po pretpostavci u XOY ravnima translaciona invarijantnost očuvana, pretpostavljamo da su koeficijenti $A_{n_x n_y n_z}$ dati na sledeći način

$$A_{n_x, n_y, n_z} = A_{n_z} e^{i(a_x n_x k_x + a_y n_y k_y)}. \quad (2.23)$$

Komponente talasnog vektora k_x i k_y se menjaju na uobičajen način kao kod odgovarajućih idealnih zapreminskih struktura

$$k_x = 2\pi\nu_x/N_x a, \quad k_y = 2\pi\nu_y/N_y a$$

$$\nu_\beta \in \begin{cases} \left[-\frac{N_\beta}{2} + 1, \frac{N_\beta}{2} \right], & N_\beta \text{ parno}, \\ \left[-\frac{N_\beta - 1}{2}, \frac{N_\beta - 1}{2} \right], & N_\beta \text{ neparno}, \end{cases} \quad \beta = x, y. \quad (2.24)$$

Primenom operatora (2.22) na stanje (2.17), te nalaženjem potrebnih komutatora koristeći eksplisitno napisan hamiltonijan (2.14), dobija se sistem jednačina za određivanje nepoznatih amplituda A_{n_z}

$$\{n_z = 0\}$$

$$[E - (2W_x + 2W_y + W_z + 2\alpha_0 + 2\beta_0 + \gamma_0) + 2(W_x + \alpha_0) \cos a_x k_x + 2(W_y + \beta_0) \cos a_y k_y] A_0 + (W_z + \gamma_0) A_1 = 0 \quad (2.25)$$

$$\{n_z = 1\}$$

$$[E - (2W_x + 2W_y + 2W_z + \gamma_0) + 2W_x \cos a_x k_x + 2W_y \cos a_y k_y] A_1 + W_z A_2 + (W_z + \gamma_0) A_0 = 0 \quad (2.26)$$

$$\{n_z = N_z\}$$

$$[E - (2W_x + 2W_y + W_z + 2\alpha_N + 2\beta_N + \gamma_N) + 2(W_x + \alpha_N) \cos a_x k_x + 2(W_y + \beta_N) \cos a_y k_y] A_N + (W_z + \gamma_N) A_{N-1} = 0 \quad (2.27)$$

$$\{n_z = N_z - 1\}$$

$$\begin{aligned} & [E - (2W_x + 2W_y + 2W_z + \gamma_N) + 2W_x \cos a_x k_x + 2W_y \cos a_y k_y] A_{N-1} + \\ & + W_z A_{N-2} + (W_z + \gamma_N) A_N = 0 \end{aligned} \quad (2.28)$$

$$\{2 \leq n_z \leq N_z - 1\}$$

$$\begin{aligned} & [E - (2W_x + 2W_y + 2W_z) + 2W_x \cos a_x k_x + 2W_y \cos a_y k_y] A_{n_z} + \\ & + W_z (A_{n_z+1} + A_{n_z-1}) = 0. \end{aligned} \quad (2.29)$$

Polazimo od jednačine (2.29). Ova jednačina se nakon deobe sa W_z , može napisati na sledeći način

$$A_{n_z+1} + A_{n_z-1} + \rho A_{n_z} = 0 ; \quad 2 \leq n_z \leq N_z - 1 , \quad (2.30)$$

gde je

$$\rho = \frac{E - 2(W_x + W_y + W_z) + 2W_x \cos a_x k_x + 2W_y \cos a_y k_y}{W_z}. \quad (2.31)$$

Na taj način, konačno dolazimo do sledećeg homogenog sistema jednačina (kao u [35]) koji sadrži $N_z + 1$ jednačinu po nepoznatim koje predstavljaju članove niza A_i , $i = 0, 1, \dots, N$

$$\rho_0 A_0 + A_1 = 0$$

$$R_0 A_0 + \rho_1 A_1 + A_2 = 0$$

$$A_1 + \rho_2 A_2 + A_3 = 0$$

$$A_{n_z-1} + \rho A_{n_z} + A_{n_z+1} = 0 \quad (2.32)$$

$$A_{N_z-3} + \rho A_{N_z-2} + A_{N_z-1} = 0$$

$$A_{N_z-2} + \rho_{N_z-1} A_{N_z-1} + R_{N_z} A_{N_z} = 0$$

$$A_{N_z-1} + \rho_{N_z} A_{N_z} = 0$$

gde je

$$\rho_0 = \frac{W_z}{W_z + \gamma_0} \rho + \frac{W_z - \gamma_0 - 4\alpha_0 \sin^2 \frac{a_x k_x}{2} - 4\beta_0 \sin^2 \frac{a_y k_y}{2}}{W_z + \gamma_0}, \quad (2.33)$$

$$\rho_{N_z} = \frac{W_z}{W_z + \gamma_{N_z}} \rho + \frac{W_z - \gamma_{N_z} - 4\alpha_{N_z} \sin^2 \frac{a_x k_x}{2} - 4\beta_{N_z} \sin^2 \frac{a_y k_y}{2}}{W_z + \gamma_{N_z}}, \quad (2.34)$$

$$\rho_1 = \rho - \frac{\gamma_0}{W_z}, \quad \rho_{N_z-1} = \rho - \frac{\gamma_{N_z}}{W_z}, \quad (2.35)$$

$$R_0 = 1 + \frac{\gamma_0}{W_z}, \quad R_{N_z} = 1 + \frac{\gamma_{N_z}}{W_z}. \quad (2.36)$$

Pošto je sistem (2.32) homogen, da bi imao netrivijalna rešenja determinanta sistema mora biti jednaka nuli, tj.

$$\mathcal{D}_{N_z+1} = \begin{vmatrix} \rho_0 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ R_1 & \rho_1 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \rho & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & \ddots & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & \rho & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & \rho_{N_z-1} & R_{N_z} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & \rho_{N_z} \end{vmatrix} = 0. \quad (2.37)$$

Determinanta (2.37) je ustvari polinom $(N_z + 1)$ -og stepena po ρ , pri čemu iz (2.31) sledi da nalaženjem korena gornjeg polinoma dobijamo energiju sistema.

Razvojem gornje determinante po prvoj vrsti (koloni) moguće je ovu determinantu izraziti preko Čebiševljevih polinoma treće vrste. Nakon relativno glomaznog računa uz korišćenje teoreme 2 iz dodatka, konačno možemo pisati

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{N_z+1} = & C_{N_z+1} + \\ & + C_{N_z} [a_0 + a_{N_z} - \Gamma_0 - \Gamma_{N_z}] + \\ & + C_{N_z-1} [(a_0 - \Gamma_0)(a_{N_z} - \Gamma_{N_z}) - \Gamma_0(a_0 + \Gamma_0 + 2) - \Gamma_{N_z}(a_{N_z} + \Gamma_{N_z} + 2)] + \\ & + C_{N_z-2} \{ \Gamma_{N_z} [(\Gamma_0 - a_0)(a_{N_z} + \alpha_{N_z}) + 2] - 1 \} + \Gamma_0 [(\Gamma_{N_z} - a_0)(a_0 + \alpha_0 + 2) - 1] \} + \\ & + C_{N_z-3} \{ \Gamma_0 \Gamma_{N_z} [(a_0 + \Gamma_0 + 2)(a_{N_z} + \Gamma_{N_z} + 2) + 2] - \Gamma_0 a_{N_z} - \Gamma_{N_z} a_0 \} + \\ & + C_{N_z-4} [\Gamma_0 \Gamma_{N_z} (4 + a_0 + a_{N_z} + \Gamma_0 + \Gamma_{N_z})] + \\ & + C_{N_z-5} \Gamma_0 \Gamma_{N_z}, \end{aligned} \quad (2.38)$$

gde su uvedene sledeće oznake

$$\Gamma_0 = \frac{\gamma_0}{W_z}; \quad \Gamma_{N_z} = \frac{\gamma_{N_z}}{W_z}, \quad (2.39)$$

$$a_0 = 1 - \Gamma_0 - 4\alpha_0 \sin^2 \frac{a_x k_x}{2} - 4\beta_0 \sin^2 \frac{a_y k_y}{2}, \quad (2.40)$$

$$a_{N_z} = 1 - \Gamma_{N_z} - 4\alpha_{N_z} \sin^2 \frac{a_x k_x}{2} - 4\beta_{N_z} \sin^2 \frac{a_y k_y}{2}, \quad (2.41)$$

pri čemu su C_n Čebiševljevi polinomi treće vrste koji su za $|\rho| < 2$ dati na sledeći način

$$C_{n_z}(\rho) = \frac{\sin[(n_z + 1)\xi]}{\sin \xi}, \quad \sin \xi \neq 0. \quad (2.42)$$

Energije elektrona se nalaze iz uslova (2.37), tj.

$$\mathcal{D}_{N_z+1} = 0 . \quad (2.43)$$

Zamenom (2.42) u (2.38) dobijamo transcendentnu jednačinu iz koje se određuju ξ (numrički ili grafički). Konačno, transcendentnu jednačinu možemo pisati u obliku koji je pogodan za grafičku analizu

$$\cot(N_z + 2)\xi = F(\xi) , \quad (2.44)$$

gde je

$$F(\xi) = \frac{1 + A_1 \cos \xi + A_2 \cos 2\xi + A_3 \cos 3\xi + A_4 \cos 4\xi + A_5 \cos 5\xi + A_6 \cos 6\xi}{A_1 \sin \xi + A_2 \sin 2\xi + A_3 \sin 3\xi + A_4 \sin 4\xi + A_5 \sin 5\xi + A_6 \sin 6\xi} , \quad (2.45)$$

$$\rho_\nu = 2 \cos \xi_\nu , \quad \nu = 1, 2, 3, \dots, N + 1 ,$$

pri čemu su A_1, \dots, A_6 , koeficijenti uz odgovarajuće Čebiševljeve polinome $C_{N_z}, \dots, C_{N_z-5}$ u jednačini (2.38).

Transcendentna jednačina (2.44) rešava se samo za interval $\xi \in (0, \pi)$. S obzirom da funkcija $\cot(N_z + 2)\xi$ ima period $\pi/(N + 2)$, jasno je da u navedenom intervalu postoji $N_z + 1$ vrednost¹⁸ (presek) ξ koja zadovoljava jednačinu (2.44).

Na osnovu (2.31) energija elektrona E je data sa

$$E_{k_x k_y \nu} = 2(W_x + W_y + W_z) - 2W_x \cos a_x k_x - 2W_y \cos a_y k_y + 2W_z \cos \xi_\nu , \quad (2.46)$$

$$\nu = 1, 2, \dots, N_z + 1 .$$

Da bi dobijeni izraz za energiju imao standardan oblik sa znakom minus ispred poslednjeg člana u (2.46), uvešćemo smenu kao u [35]

$$\xi_\nu = \pi - a_z k_z , \quad (2.47)$$

pa je konačan izraz za energiju

$$E_{k_x k_y \nu} = 2(W_x + W_y + W_z) - 2W_x \cos a_x k_x - 2W_y \cos a_y k_y - 2W_z \cos(a_z k_z)_\nu , \quad (2.48)$$

pri čemu ν mora uzeti $N_z + 1$ vrednost.

Kada je ispunjen uslov (2.37), onda se sistem homogenih jednačina (2.32) rešava tako što se sve jednačine podeli sa A_{N_z} i poslednja od tako dobijenih jednačina odbaci. Tako se dobija sledeći sistem

$$\rho_0 B_0 + B_1 = 0 \quad (2.49)$$

$$R_0 B_0 + \rho_1 B_1 + B_2 = 0 \quad (2.50)$$

¹⁸U opštem slučaju broj preseka može biti i manji od $N_z + 1$, slično kao kod fonona u prvoj glavi. To naravno zavisi od veličine površinskih parametara koji ulaze u transcendentnu jednačinu (na desnoj strani).

$$B_1 + \rho B_2 + B_3 = 0 \quad (2.51)$$

$$B_{n_z-1} + \rho B_{n_z} + B_{n_z+1} = 0 \quad (2.52)$$

$$B_{N_z-3} + \rho B_{N_z-2} + B_{N_z-1} = 0 \quad (2.53)$$

$$B_{N_z-2} + \rho_{N_z-1} B_{N_z-1} + R_{N_z} = 0 \quad (2.54)$$

gde je

$$B_{n_z} = \frac{A_{n_z}}{A_{N_z}}, \quad n_z = 0, 1, \dots, N_z - 1.$$

Relacija (2.52) je linearna diferencna jednačina (homogena) sa konstantnim koeficijentima. Rešenje ove jednačine ćemo potražiti u obliku

$$B_n = (-1)^{n_z} [a \sin(n_z - 1)\xi + b \sin n_z \xi + c \sin(n_z + 1)\xi], \quad (2.55)$$

pri čemu su $a = a(\xi)$, $b = b(\xi)$ i $c = c(\xi)$ nepoznati koeficijenti.

Zamenom (2.55) u (2.52) dobijamo

$$B_{n_z+1} + B_{n_z-1} = -2 \cos \xi B_{n_z}. \quad (2.56)$$

Očigledno je da rešenje (2.55) zadovoljava sve jednačine (za $n_z = 2, 3, \dots, N_z - 2$) ako je

$$\rho = 2 \cos \xi. \quad (2.57)$$

Nepoznati koeficijenti se određuju iz uslova da jednačine (2.49), (2.50) i (2.54) budu zadovoljene. Na taj način dolazimo do linearog nehomogenog sistema jednačina po nepoznatim a , b , c , koji je oblika

$$(\rho_0 \sin \xi)a + (-\sin \xi)b + [(\rho_0 - 1) \sin \xi]c = 0$$

$$[(1 - R_0) \sin \xi]a + (\sin 2\xi - \rho_1 \sin \xi)b + [(R_0 - \rho_1) \sin \xi + \sin 3\xi]c = 0 \quad (2.58)$$

$$[\rho_{N_z-1} \sin(N_z - 2)\xi - \sin(N_z - 3)\xi]a + [\rho_{N_z-1} \sin(N_z - 1)\xi - \sin(N_z - 2)\xi]b +$$

$$+ [\rho_{N_z-1} \sin N_z \xi - \sin(N_z - 1)\xi]c = (-1)^N R_{N_z}.$$

Da bi ovaj sistem imao jedinstveno rešenje njegova determinanta

$$d = \begin{vmatrix} \rho_0 \sin \xi & -\sin \xi & (\rho_0 - 1) \sin \xi \\ (1 - R_0) \sin \xi & \sin 2\xi - \rho_1 \sin \xi & (R_0 - \rho_1) \sin \xi + \sin 3\xi \\ \rho_{N_z-1} \sin(N_z - 2)\xi - \sin(N_z - 3)\xi & \rho_{N_z-1} \sin(N_z - 1)\xi - \sin(N_z - 2)\xi & \rho_{N_z-1} \sin N_z \xi - \sin(N_z - 1)\xi \end{vmatrix} \quad (2.59)$$

mora biti različita od nule. Na taj način koreni, odnosno nepoznati koeficijenti a , b i c se izražavaju po Kramerovom pravilu

$$a = \frac{d(a)}{d}, \quad b = \frac{d(b)}{d}, \quad c = \frac{d(c)}{d}, \quad (2.60)$$

gde su

$$d(a) = (-1)^{N_z} R_{N_z} [-\sin \xi \sin 3\xi - (\rho_0 - 1) \sin \xi \sin 2\xi + (\rho_0 \rho_1 - R_0) \sin^2 \xi], \quad (2.61)$$

$$d(b) = (-1)^{N_z} R_{N_z} [\rho_0 \sin \xi \sin 3\xi - (\rho_0(\rho_1 - 1) - R_0 + 1) \sin^2 \xi], \quad (2.62)$$

$$d(c) = (-1)^{N_z} R_{N_z} [-\rho_0 \sin \xi \sin 2\xi + (\rho_0 \rho_1 - (R_0 - 1)) \sin^2 \xi] \quad (2.63)$$

determinante koje dobijamo iz d zamenom kolone sastavljene od koeficijenata uz nepoznate a , b i c , sa kolonom sastavljenom od slobodnih članova $(0, 0, (-1)^{N_z} R_{N_z})^T$.

Sada možemo naći jednoelektronsku talasnu funkciju (2.17). Uslov normiranja (2.18) se svodi na

$$N_x N_y \sum_{n=0}^{N_z} A_n^2 = 1. \quad (2.64)$$

Deobom ove jednačine sa A_{N_z} dobijamo

$$A_{N_z} = \frac{1}{\sqrt{N_x N_y \left\{ 1 + \sum_{m=0}^{N_z-1} B_m^2 \right\}}}; \quad A_n = A_{N_z} B_n. \quad (2.65)$$

Prema tome, konačano možemo pisati izraz za amplitudu

$$A_n(\xi) = (-1)^n \frac{F_n(\xi)}{\sqrt{N_x N_y \left\{ 1 + \sum_{m=0}^{N_z-1} [F_m(\xi)]^2 \right\}}} \quad (2.66)$$

$$F_n(\xi) = \frac{d(a)}{d(\xi)} \sin(n-1)\xi + \frac{d(b)}{d(\xi)} \sin n\xi + \frac{d(c)}{d(\xi)} \sin(n+1)\xi,$$

odnosno jednoelektronske talasne funkcije

$$|\Psi_1\rangle = \sum_{n_x n_y} \sum_{n=0}^{N_z} A_n(\xi) e^{i(a_x k_x n_x + a_y k_y n_y)} a_{n_x n_y n_z}^+ |0\rangle. \quad (2.67)$$

Stanja sa koeficijentima (2.66) nazivaju se zapreminska stanja jer su koeficijenti periodične funkcije po n_z pa su im kvadrati modula približno jednaki na svim slojevima.

Poznato je da u strukturama sa graničnom površinom, pored zapreminskih postoje i površinska stanja [36], [37] koja su lokalizovana u blizini graničnih površina. Takva stanja

moraju imati amplitudu verovatnoće A oblika

$$A_{n_x n_y n_z}^S = D_0 e^{-\eta n_z} e^{i(a_x n_x k_x + a_y n_y k_y)}, \quad \eta > 0. \quad (2.68)$$

Jasno je da funkcije $D_0 e^{-\eta n_z}$ ne mogu da zadovolje sve jednačine sistema (2.32). Ispostavlja se da ih one zadovoljavaju samo onda ako druga i preposlednja jednačina sistema (2.32) postanu identične sa jednačinom $A_{n_z-1} + \rho A_{n_z} + A_{n_z+1} = 0$, a to je moguće samo ako je [35]

$$\gamma_0 = \gamma_N = 0. \quad (2.69)$$

Ovo praktično znači da se uslov egzistencije površinskih stanja svodi na zahtev da se matrični element jon-jon interakcije W_z nesme menjati na granici. Ovakav uslov se verovatno može samo veštački zadovoljiti, recimo primenom pritiska ili nekim posebnim ekraniranjem graničnih slojeva. U slučaju da je uslov (2.69) ispunjen, energije površinskih stanja dobijaju se iz (2.47) prelazom $(a_z k_z)_v \rightarrow i\eta$.

Posle zamene (2.68) u sistem jednačina (2.32), veoma se uprošćava jer se obično koristi aproksimacija $e^{-2\eta n} \approx 0$ za $n > 2$. Koeficijent η nadan je iz uslova (2.37) u kome su izvršene unapred pomenute zamene usled kojih $\rho \rightarrow 2 \cosh \eta$.

Za koeficijent η je numeričkim računom dobijena jedna vrednost tako da se može reći da postoji jedno površinsko stanje. Osim toga verovatnoća lociranja elektrona na površini je daleko veća nego verovatnoća lociranja zapreminskih stanja u balku ili na površinskim slojevima. Rezultati analize biće dati u sledećem paragrafu.

2.2 Analiza rešenja nulte aproksimacije

Ako se popravke na interakcije između graničnih slojeva zanemare, tj. uzme da je¹⁹

$$\alpha_0 = \alpha_{N_z} = \beta_0 = \beta_{N_z} = \Gamma_0 = \Gamma_{N_z} = 0, \quad a_0 = a_{N_z} = 1, \quad (2.70)$$

tada uslov (2.37) za određivanje energija u nultoj aproksimaciji se svodi nakon jednostavnih transformacija na oblik

$$(\rho + 2)C_{N_z} = 0. \quad (2.71)$$

S obzirom na (2.42) ova jednačina postaje

$$2 \cos^2 \frac{\xi}{2} \frac{\sin(N_z + 1)\xi}{\sin \xi} = 0; \quad \sin \xi \neq 0. \quad (2.72)$$

¹⁹U tom slučaju je prema (2.33) i (2.34)

$$\rho_0 = \rho_{N_z} = \rho + 1,$$

a iz (2.35) sledi da je

$$\rho_1 = \rho_{N_z} = \rho.$$

Prema (2.36) je

$$R_0 = R_{N_z} = 1.$$

Uslov (2.72) od Čebiševljevog polinoma daje N_z rešenja za veličinu ξ , tj.

$$\xi_\nu = \frac{\pi}{N_z + 1} \nu ; \quad \nu = 1, 2, \dots, N_z . \quad (2.73)$$

Treba istaći da $\nu = 0$ ($\xi = 0$) i $\pi \xi = N_z + 1$ nisu nule Čebiševljevog polinoma. Iz (2.71) odnosno (2.72) sledi da je $\rho = -2$. Kako je $\rho = 2 \cos \xi$ onda se koren $\xi = \pi$, formalno može uključiti u gornji zapis tako da (2.73) sada daje svih $N_z + 1$ rešenja. Na osnovu (2.73) moguće je uvesti komponentu kvaziimpulsa²⁰ ($p_z = \hbar k_z$) duž z -pravca kao

$$p_z = \frac{\pi \nu}{(N_z + 1)a_z} ; \quad \nu = 1, 2, \dots, N_z + 1 . \quad (2.74)$$

Iz ove formule se vidi da u tankom kristalu (filmu) projekcija kvaziimpulsa elektrona koja je normalna na površinu kristala (p_z -komponenta duž z -pravca) je kvantovana, tj. može poprimati neke odredene vrednosti [41]-[43], koje su odredene debljinom filma L ($L = N_z a_z$ debljina filma). Ovo kvantovanje kvaziimpulsa povezano je sa ograničenim kretanjem elektrona duž z -pravca (takođe videti i u [44]) usled konačne debljine filma odnosno postojanja granica u sistemu.

Polazeći od jednačine (2.31), energije elektrona su date izrazom

$$E_{k_x k_y \nu} = 2(W_x + W_y + W_z) - 2W_x \cos a_x k_x - 2W_y \cos a_y k_y + 2W_z \cos \xi_\nu . \quad (2.75)$$

S obzirom na rečeno (kvantovanost kvaziimpulsa duž z -pravca), jasno je da je zbog toga energetski spektar potpuno diskretan i da se razbija na sistem dvodimenzionalih podzona [45], [46]. U literaturi ova diskretnost energije (kvantni efekat - "quantum size effects") poznata je kao dimenziono kvantovanje²¹ [42], [44].

Prema tome elektronski sistem u tankim filmovima se ponaša kao kvazidvodimenzioni elektronski sistem. To je i razumljivo, jer kako je već naglašeno elektroni se slobodno kreću u XY ravnima, dok im je duž z -pravca kretanje ograničeno zbog realno postojećih granica u sistemu.

Očigledno da finitno kretanje elektrona u jednom od pravaca dovodi do korenite izmene energetskog spektra i na taj način suštinske izmene svojstava elektroanskog sistema.

Takođe je nedavno pri ispitivanju dvodimenzionalih elektronskih sistema u magnetnom polju²², otkrivena ovde nova pojava - kvantni Holov efekt [47]. On omogućuje da se neposredno odredi veličina h/e^2 i na taj način konstanta fine strukture α kao jedna od najvažnijih fundamentalnih fizičkih konstanti.

²⁰Zbog diskretnе simetrije očuvan je kvaziimpuls elektrona a ne impuls. Treba naglasiti da veličina k_z u filmu, uvedena na opisan način, naravno, nema u pravom smislu te reči smisao talasnog vektora. U realnosti, za k_z pri interakciji sa slobodnim elektronom ne važi zakon očuvanja impulsa, što je naravno posledica odsustva prostorne homogenosti duž z -ose.

²¹Pod terminom dimenziona kvantizacija, podrazumeva se zavisnost svojstava čvrstog tela od njegove geometrijske razmere. Pri zadovoljenju uslova neophodnih za pojavu kvantnog dimenzionog efekta, svi parametri tankog filma, koji karakterišu proces prenosa, osciluju pri promeni debljine [42]. Ovaj efekat je zapažen na pločicama od Bi (1965.god.- Luckii sa saradnicima).

²²Za otkriće kvantnog Holovog efekta, Klausu fon Klicingu je dodeljena Nobelova nagrada za fiziku u 1985. godini.

Važno je istaći da se član u poslednjem izrazu za energiju (2.75), pojavljuje sa suprotnim predznakom u odnosu na odgovarajući izraz idealne beskonačne strukture. Isti rezultat je dođen i u radu [7] i tu nije vršena prenumeracija, što je vodilo na niz komplikovanih interpretacija rezultata. Tamo je ostalo otvoreno pitanje koncepcije termodinamičkog limesa. Prilikom povećanja broja slojeva N_z (u limesu $N_z \rightarrow \infty$), izraz (2.75) kao i u pomenutom radu ne može da se svede na odgovarajući izraz za masivnu strukturu. Ta nekonzistentnost u „nepostojanju“ termodinamičkog limesa je otklonjena najpre u radu [48] (a potom i u [35]), tako što je redefinisan izraz (2.74) za p_z odnosno k_z , jednostavnim prenumerisavanjem, tj.

$$\nu = N_z + 1 - \mu . \quad (2.76)$$

U tom slučaju izraz (2.73) postaje

$$\xi_\nu = \frac{\pi}{N+1} \nu \rightarrow \eta_\mu = \left(\pi - \frac{\pi\mu}{N_z+1} \right) ,$$

$$\nu = 1, 2, \dots, N_z + 1 , \quad \mu = 0, 1, 2, \dots, N_z .$$

Dalje se može pisati da je

$$2W_z \cos \xi_\nu \rightarrow -2W_z \cos \eta_\mu = -2W_z \cos \frac{\pi\mu}{N_z+1} , \quad (2.77)$$

tj.

$$a_z k_z = \frac{\pi\mu}{(N_z+1)} ; \quad \mu = 0, 1, \dots, N_z . \quad (2.78)$$

Treba zapaziti da na osnovu poslednje dobijene formule, maksimalna vrednost veličine $a_z k_z$ iznosi $\frac{\pi N_z}{N_z+1}$, tj. manja je od π kako bi to bilo u idealnoj strukturi. To drugim rečima znači da u nultoj aproksimaciji Fermi sfera „doživljava“ slabu deformaciju i pretvara se u elipsoid [42].

Konačno, izraz za energiju elektrona (2.75) postaje

$$E_{k_x k_y \nu} = 2(W_x + W_y + W_z) - 2W_x \cos a_x k_x - 2W_y \cos a_y k_y - 2W_z \cos a_z k_z ,$$

$$k_z = \frac{\pi\mu}{(N_z+1)a_z} ; \quad \mu = 0, 1, \dots, N_z . \quad (2.79)$$

Kod masivnih struktura vrednosti komponenata talasnih vektora na granici Briluenove zone su $(a_x k_x)_{max} = (a_y k_y)_{max} = (a_z k_z)_{max} = \pi$, pa je očigledno,

$$E_{bulk} = 4(W_x + W_y + W_z) . \quad (2.80)$$

U filmu su maksimalne vrednosti za talasne vektore na granici Briluenove zone date sa

$$(a_x k_x)_{max} = (a_y k_y)_{max} = \pi ; \quad (a_z k_z)_{max} = \frac{N_z}{N_z+1} \pi . \quad (2.81)$$

Vidi se da je u filmu veličina $(a_z k_z)_{max}$ manja nego odgovarajuća u zaprinoskoj strukturi. S druge strane u termodinamičkom limesu izraz za $(a_z k_z)$ u (2.81) se svodi na vrednost u balku

$$\lim_{N_z \rightarrow \infty} (a_z k_z)_{film} = \pi = (a_z k_z)_{bulk} , \quad (2.82)$$

čime je pomenuti problem otklonjen i pokazano je da postoji termodinamički limes što je bilo prirodno za očekivati. S druge strane to u svakom slučaju potvrđuje valjanost i konzistentnost gornjih rezultata sa odgovarajućim poznatim rešenjima kod masivnih struktura.

Takođe, dobijeni rezultat ukazuje da se u najnižoj nultoj aproksimaciji koja je ovde korišćena, elektronski spektar u filmu ne menja drastično u odnosu na odgovarajući u zapreminske strukture. Ipak treba istaći suštinsku razliku koja je već napomenuta a sastoji se u tome da se spektar u tankom filmu razbija na sistem dvodimenzionih podzona što kod zapreminskih struktura ne postoji.

Najveća promena je na granici Briluenove zone gde je

$$(E_{bulk} - E_{film})_{Bz} = 4W_z \cos^2 \frac{N_z \pi}{2(N_z + 1)}. \quad (2.83)$$

Očigledno da je razlika veća ukoliko je film tanji i izčezava u termodinamičkom limesu ($N_z \rightarrow \infty$) kada film postaje zapreminska struktura i kada efekti koji potiču zbog prisustva granica postaju zanemarivi.

2.3 Talasna funkcija u nultoj aproksimaciji

Da bismo našli talasnu funkciju potrebno je najpre odrediti nepoznate amplitudе preko kojih je zadata jednoelektronska talasna funkcija. Koeficijenti A_{n_z} se određuju iz sistema jednačina (2.32) koji se sada koristeći uslov (2.70), redukuje na sledeći sistem po nepoznatim amplitudama koje su date preko niza A_i ($i = 0, 1, \dots, N_z$)

$$RA_0 + A_1 = 0, \quad n_z = 0 \quad (2.84)$$

$$A_{n_z-1} + \rho A_{n_z} + A_{n_z+1} = 0, \quad 1 \leq n_z \leq N_z - 1 \quad (2.85)$$

$$A_{N_z-2} + \rho A_{N_z-1} + A_{N_z} = 0, \quad n_z = N_z - 1 \quad (2.86)$$

$$A_{N_z-1} + RA_{N_z} = 0, \quad n_z = N_z \quad (2.87)$$

gde je $R = \rho + 1$.

Gornji sistem jednačina rešava se tako što se odbaci recimo pretposlednja jednačina (2.86) a preostale jednačine se rešavavaju po nepoznatim A_{n_z}/A_{N_z} . Tada gornji sistem postaje

$$RB_0 + B_1 = 0, \quad n_z = 0 \quad (2.88)$$

$$B_{n_z-1} + \rho B_{n_z} + B_{n_z+1} = 0, \quad 1 \leq n_z \leq N_z - 1 \quad (2.89)$$

$$B_{N_z-1} + R = 0, \quad n_z = N_z \quad (2.90)$$

gde je uvedena smena

$$B_{n_z} = \frac{A_{n_z}}{A_{N_z}}. \quad (2.91)$$

Rešenje rekurentne relacije (2.89) potražimo u obliku

$$B_n = (-1)^{n_z} [\alpha \sin n_z \xi + \beta \sin(n_z - 1) \xi]. \quad (2.92)$$

Zamenom ove formule u izraz (2.89) dobija se

$$B_{n_z+1} + B_{n_z-1} = -2 \cos \xi B_{n_z}, \quad (2.93)$$

odakle sledi da je $\rho = 2 \cos \xi$. To rešenje treba da zadovoljava i dve granične jednačine (2.88) i (2.90) iz kojih određujemo nepoznate konstante α i β .

Iz (2.92) sledi

$$B_0 = -\beta \sin \xi; \quad B_1 = -\alpha \sin \xi, \quad (2.94)$$

odnosno

$$B_{N_z-1} = -(-1)^\mu [\alpha \sin 2\xi + \beta \sin 3\xi]; \quad \mu = N_z + 1 - \nu, \quad \mu = 0, 1, \dots, N_z. \quad (2.95)$$

Na taj način dolazimo do nehomogenog sistema od dve jednačine sa dve nepoznate (koeficijenti α i β), tj.

$$\begin{aligned} (\sin \xi) \alpha + (R \sin \xi) \beta &= 0 \\ (\sin 2\xi) \alpha + (\sin 3\xi) \beta &= (-1)^{N_z} R . \end{aligned} \quad (2.96)$$

Standardnim rešavanjem, konačno dobijamo za koeficijente

$$\alpha = (-1)^\mu \frac{R}{\sin \xi} , \quad \beta = (-1)^{\mu+1} \frac{1}{\sin \xi} . \quad (2.97)$$

Pripadne amplitude su

$$B_{n_z} = (-1)^{n_z+\mu} \frac{\sin n_z \xi + \sin(n_z+1)\xi}{\sin \xi} , \quad (2.98)$$

$$\mu = N_z + 1 - \nu \in 0, 1, \dots, N_z .$$

S obzirom na (2.91) i uslov normiranja talasne funkcije (2.18), možemo pisati

$$N_x N_y A_{N_z}^2 \sum_{n_z=0}^{N_z} B_{n_z}^2 = 1 . \quad (2.99)$$

Nakon odgovarajućih sumiranja u gornjem izrazu uz uslov da ξ_ν zadovoljavaju jednačinu (2.74) odnosno (2.78), konačno dobijamo izraz za amplitude

$$A_{n_z}^{(0)}(k_z) = \begin{cases} \sqrt{\frac{1}{N_x N_y (N_z + 1)}} & , \quad \mu = 0 \quad (\rho = -2) \\ (-1)^\mu \sqrt{\frac{2}{N_x N_y (N_z + 1)}} \cos(n_z + \frac{1}{2}) \frac{\pi \mu}{N_z + 1} & , \quad \mu = 1, 2, \dots, N_z . \end{cases} \quad (2.100)$$

Na osnovu poslednjeg izraza za koeficijente $A_{n_z}^{(0)}(k_z)$ kao i jednačine (2.23) za $A_{n_x n_y n_z}$, dobijamo jednoelektronsku talasnu funkciju u multoj aproksimaciji

$$|\Psi_{k_x k_y \mu}^{(0)}\rangle = (-1)^\mu \sqrt{\frac{2}{N_x N_y (N_z + 1)}} \sum_{n_x n_y n_z} e^{i(a_x k_x n_x + a_y k_y n_y)} \cos \left[(n_z + \frac{1}{2}) \frac{\pi \mu}{N_z + 1} \right] a_{n_x n_y n_z} |0\rangle . \quad (2.101)$$

Nije teško pokazati da su talasne funkcije (2.101) ortogonalne, tj. da važi

$$\langle \Psi_{q_x q_y \nu}^{(0)} | \Psi_{k_x k_y \mu}^{(0)} \rangle = \delta_{k_x q_x} \delta_{k_y q_y} \delta_{\mu \nu} , \quad (2.102)$$

odakle neposredno sledi i pravilo ortogonalnosti koeficijenata

$$\sum_{n_x n_y n} A_{n_z}^{*(0)} A_{n_z}^{(0)} = \delta_{k_x q_x} \delta_{k_y q_y} \delta_{\mu \nu} . \quad (2.103)$$

Sada možemo preći na dijagonalizaciju hamiltonijana H_0 nulte aproksimacije. Kako je prema (2.22)

$$[a_{n_x n_y n_z}, H_0] = E_0 a_{n_x n_y n_z} , \quad n_z = 0, 1, 2, \dots, N_z , \quad (2.104)$$

gde je E_0 , energija u nultoj aproksimaciji i data je izrazom (2.79)

$$E_0 \equiv E_{k_x k_y \mu}^{(0)} = 6W - 2W \cos a_x k_x - 2W \cos a_y k_y - 2W \cos \frac{\pi \mu}{N+1}, \quad (2.105)$$

$$\mu = 0, 1, \dots, N.$$

S obzirom na (2.104) i (2.105), hamiltonijan nulte aproksimacije H_0 se može pisati

$$H_0 = \sum_{n_x n_y n_z} E_{k_x k_y \mu}^{(0)} a_{n_x n_y n_z}^+ a_{n_x n_y n_z}, \quad n_z = 0, 1, \dots, N_z. \quad (2.106)$$

Sada je potrebno preći sa operatora $a_{n_x n_y n_z}$ u prostor talasnih vektora $a_{k_x k_y \mu}$.

Na standardan način (videti u [14], [49]) prelaskom sa operatora $a_{n_x n_y n_z}$ u prostor talasnih vektora $a_{k_x k_y \mu}$, možemo pisati²³

$$a_{n_x n_y n_z} = \sum_{k_x k_y \mu} A_{n_z}^{(0)} a_{k_x k_y \mu}, \quad (2.107)$$

gde su koeficijenti $A_{n_z}^{(0)}$ amplitude u razvoju jednočestične talasne funkcije.

Zamenom (2.107) u (2.106) i s obzirom na uslov (2.103), hamiltonijan nulte aproksimacije postaje dijagonalan, tj.

$$H_0 = \sum_{k_x k_y \mu} E_{k_x k_y \mu}^{(0)} a_{k_x k_y \mu}^+ a_{k_x k_y \mu} \quad (2.108)$$

gde je $E_{k_x k_y \mu}^{(0)}$ energija elektrona u nultoj aproksimaciji data jednačinom (2.105).

2.4 Površinska deformacija i njen uticaj na spektar i stanja

Već je naglašeno da postojanje granica u sistemu dovodi do toga da je energetski spektar kvazidvodimenzionog karaktera i da se razbija na sistem dvodimenzionalih podzona. Takode postojanje granica dovodi do pojave pobudenja koja su lokalizovana u okolini njih. Naše analize pokazuju da je to moguće ako je $\gamma_0 = \gamma_{N_z} = 0$, što praktično znači da se uslov egzistencije površinskih stanja svodi na zahtev da granična interakcija mora ostati nepromenjena u pravcu narušenja simetrije. Očigledno je da ovakav uslov (zahtev) može da se postigne samo veštački (npr. menjanjem pritiska na granicama, ekraniranjem graničnih slojeva ili na neki drugi način).

Treba naglasiti da su ova istraživanja veoma aktuelna s obzirom na činjenicu da se danas mogu praviti izvanredno tanki filmovi (čak troslojni). Osim toga, ovih dana je objavljena vest da je u Laboratoriji u Los Alamosu dobijen visokotemperaturski superprovodnik koji je izvanredno tanak film i kod koga je gustina struje relativno visoka.

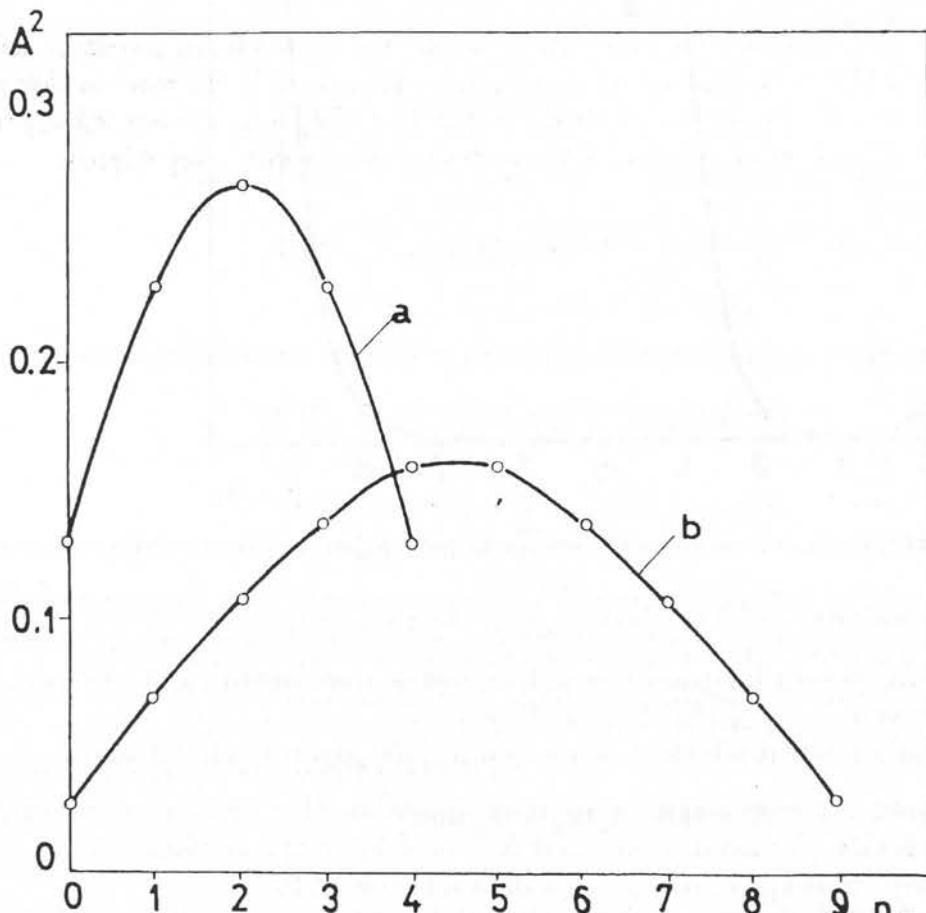
²³Takode je moguće je uvesti i inverznu transformaciju, množeći najpre sa A^* a zatim sumiranjem po n_x, n_y, n_z , čime dobijamo

$$a_{k_x k_y \mu} = \sum_{n_x n_y n_z} A_{n_z}^{(0)*} a_{n_x n_y n_z}.$$

To navodi na činjenicu da pošto je film izvanredno tanak, „sakrivanja“ superprovodne struje u unutrašnjim slojevima ne može biti. U tom smislu su naša istraživanja i usledila u tom pravcu.

Cilj je bio da se elektroni „isteraju“ na površinu ili blizu površine filma, tj. da se poveća verovatnoća nalaženja elektrona baš na tim mestima. S obzirom da koeficijenti u razvoju jednoelektronske talasne funkcije predstavljaju verovatnoću nalaženja elektrona na mestu \vec{n} , u tom smislu su izvršene analize (videti [35]) kvadrata modula koeficijenata u izrazu za zapreminska i površinska stanja.

Numeričke kalkulacije konfiguracione raspodele zapreminske i površinske elektro-nskih stanja izvršene su za petoslojne i desetoslojne strukture. Rezultati ovih analiza prikazani su na sl. 2.1.

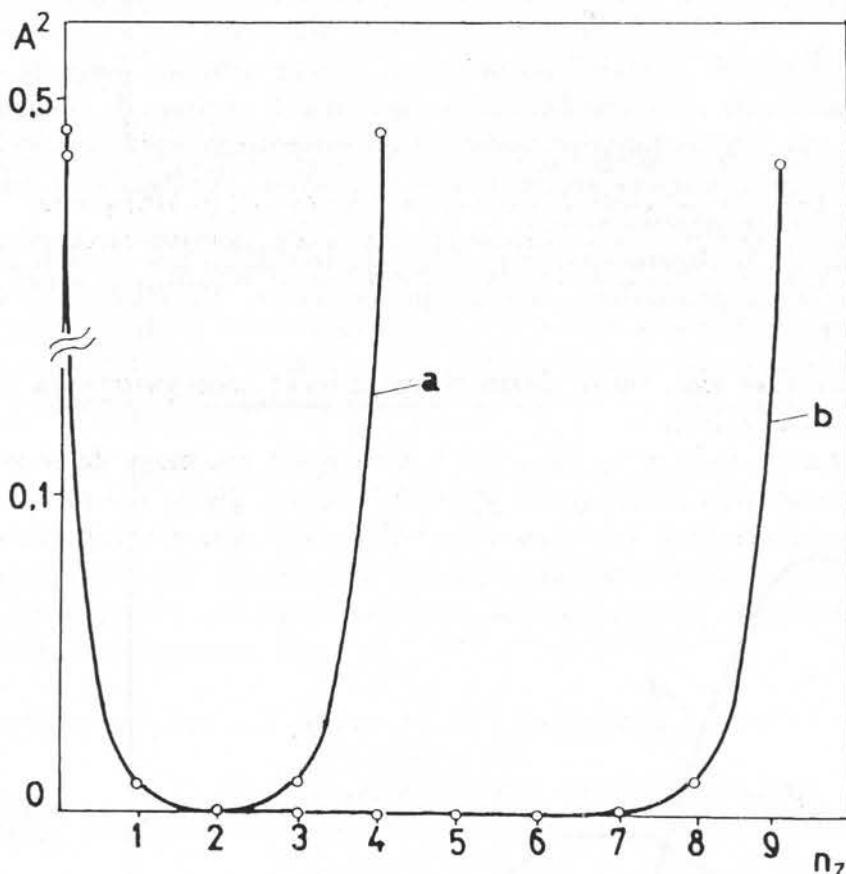


Slika 2.1. Prostorna raspodela elektrona za $k = k_F$ pri $a \in (0, 1/4)$ gde je $a = \alpha_0 = \beta_0 = \alpha_N = \beta_N$ i $\gamma_0 = \gamma_N = 0$. Kriva (a) odgovara petoslojnoj strukturi za $(a_z k_z)_{max} = 2.73$, a kriva (b) desetoslojnoj strukturi za koju je $(a_z k_z)_{max} = 2.89$.

Kao što se sa date slike vidi, Fermi elektroni imaju maksimum gustine na srednini filma bez obzira na njegovu debljinu.

Međutim, rekli smo da kada je $\gamma_0 = \gamma_{Nz} = 0$, onda u sistemu mogu da se pojave i površinska stanja. Razmatran je slučaj $a = \alpha_0 = \beta_0 = \alpha_N = \beta_N = 1$, i nađeno je da postoji jedno površinsko stanje za $k_x = \pi/a_x$ i $k_y = \pi/a_y$ za koje je $\eta = 1.95$. Prostorna

raspodela površinskog stanja data je na sl. 2.2.



Slika 2.2. Prostorna raspodela površinskih stanja za petoslojnu (a) i desetoslojnu strukturu (b).

Maksimalna verovatnoća lociranja iznosi 0.48, dok je maksimum na sl. 2.1 (a) i (b) 0.27 i 0.16 respektivno.

Pripadna energija površinskih elektrona za slučaj koji odgovara sl. 2.2 iznosi

$$E = 4(W_x + W_y - W_z \sinh^2 \frac{\eta}{2}), \quad (2.109)$$

dok je u slučaju zapreminskih stanja energija data izrazom (2.48).

Na osnovu iznesenih podataka može se zaključiti da u filmu teku površinske struje tek ako se stvore površinska elektronska stanja. Ove struje su gušće od zapreminskih struja jer je energija površinskih stanja znatno niža od energije zapreminskih.

Osim toga, energija površinskih stanja je niža od energije zapreminskih stanja pa je populacija površinskih stanja veća, što znači da su površinske struje gušće od zapreminskih.

Ovo je vrlo važno sa praktične tačke gledišta, jer ako se realizuju navedeni uslovi tada će svi elektroni biti koncentrisani na graničnim površinama. S obzirom da elektroni na ovim površinama tada imaju konstantne energije (bez disperzije), to u velikoj meri smanjuje mogućnost njihove interakcije sa fononima i pojavu električnog otpora.

2.5 Ravnomerena prostorna perturbacija filma

U prethodnom paragrafu izložena je teorija neperturbovanog filma kod koga su uzete u obzir samo promene jon-jon interakcije na granici. U ovoj podsekciji biće ispitana film kod koga je translaciona simetrija narušena po celoj zapremini. Narušenje simetrije biće tretirano kao perturbacija i biće iskorišćene osnovne perturbacione formule koje su korišćene u radu [7] i [8], gde je ustvari prvi put izložena teorija struktorno deformisanih filmova.

Ravnomeran doping tipa naparavanja sa jedne površine uraden je najpre u radu [50]. Međutim, u radu [35] se pretpostavlja da perturbacija ima ravnomeru prostornu raspodelu u blizini granica filma dok je centralni deo ostao neperturbovan.

De fakto mi imamo troslojnju strukturu koja je ustvari deformisana dopingom tipa naparavanja i to simetrično na obe granične površine.

Pretpostavljeno je da je perturbacija prostorno ravnomerno raspoređena (samo duž z -pravca)

$$\delta W = \begin{cases} \epsilon, & n_z \in [0, N_1] \\ 0, & n_z \in (N_1, N_2) \quad (\text{za svako } n_x, n_y), \\ \epsilon', & n_z \in [N_2, N] \end{cases} \quad (2.110)$$

$0 < N_1 < N_2; \quad N_1 < N_2 < N_z.$

Popravke energije i talasne funkcije u prvoj aproksimaciji imaju oblik (kao u [7] i [8])

$$E_{k_x k_y k_z}^{(1)} = V_{k_x k_y k_z}^{k_x k_y k_z} \equiv \langle \Psi_{k_x k_y k_z}^{(0)} | \delta W | \Psi_{k_x k_y k_z}^{(0)} \rangle, \quad (2.111)$$

$$|\Psi_{\vec{k}}^{(1)}\rangle = |\Psi_{\vec{k}}^{(0)}\rangle + \sum_{\vec{q} \neq \vec{k}} \frac{V_{\vec{q}\vec{k}}}{E_{\vec{k}}^{(0)} - E_{\vec{q}}^{(0)}} |\Psi_{\vec{q}}^{(0)}\rangle, \quad (2.112)$$

pri čemu su energije nulte aproksimacije date izrazom (2.79), dok su talasne funkcije nulte aproksimacije date formulom (2.101). Matrični elementi $V_{\vec{q}\vec{k}}$ su dati sa

$$V_{\vec{q}\vec{k}} = V_{q_x q_y q_z}^{k_x k_y k_z} \equiv \langle \Psi_{k_x k_y k_z}^{(0)} | \delta W | \Psi_{q_x q_y q_z}^{(0)} \rangle, \quad (2.113)$$

gde je interakcija δW data sa (2.110).

Koristeći formulu (2.111), može se odrediti popravka na energije u sloju $[0, N_1]$. Nakon nalaženja jednostavnih suma konačno se dobija sledeći izraz za popravku

$$V_{k_x k_y \mu}^{k_x k_y \mu} = \frac{2\epsilon}{N+1} \left\{ (N_1 + 1)(1 - \cos d_z k_z) - \frac{1}{4} \left(1 + \frac{\sin(2N_1 + 1)d_z k_z}{\sin d_z k_z} \right) \times \right. \\ \left. \times (1 + \cos 2d_z k_z) + \frac{\sin(2N_1 + 2)d_z k_z}{2 \sin d_z k_z} + \cos d_z k_z \cdot \sin N_1 d_z k_z \cdot \sin(N_1 + 1)d_z k_z \right\}, \quad (2.114)$$

dok u sloju $[N_2, N_z]$ ona iznosi

$$V_{k_x k_y \mu}^{k_x k_y \mu} = \frac{2\epsilon'}{N+1} \left\{ (N - N_2 + 1)(1 - \cos d_z k_z) + \frac{1}{4 \sin d_z k_z} [\sin(2N_2 - 1)d_z k_z - \right. \\ \left. - \sin(2N + 1)d_z k_z](1 + \cos 2d_z k_z) + \frac{\sin(2N + 2)d_z k_z - \sin 2N_2 d_z k_z}{2 \sin d_z k_z} + \right. \\ \left. \right\} \quad (2.115)$$

$$+ \cos d_z k_z (\sin N d_z k_a \cdot \sin(N+1) d_z k_z - \sin N_2 d_z k_z \sin(N_2-1) d_z k_z) \} .$$

U srednjem neperturbovanom sloju (N_1, N_2) energija je data formulom (2.79).

Na osnovu navedenih formula može se zaključiti da je u sloju $[0, N_1]$ popravka na energiju (2.79) pozitivna (ako je $\epsilon > 0$), dok je u sloju $[N_2, N_z]$ negativna (ako je $\epsilon' < 0$). Drugim rečima, energija elektrona se stepenasto menja po slojevima pri čemu neperturbirani sloj uvek ima energiju koja leži između energija perturbovanih slojeva.

Da bi se ispitala prostorna raspodela elektrona za datu perturbaciju, iskoristićemo gotovu formulu iz rada [7], koja može biti uz izvesna opravdana zanemarivanja napisana na sledeći način

$$A_{n_x n_y n_z}^{(1)}(k_x k_y k_z) = A_{n_x n_y n_z}^{(0)}(k_x k_y k_z) \left[1 + \frac{\delta A_{n_z}(k_x k_y k_z)}{A_{n_x n_y n_z}^{(0)}(k_x k_y k_z)} \right] , \quad (2.116)$$

gde je

$$A_{n_x n_y n_z}^{(0)}(k_x k_y k_z) = An_z^{(0)}(k_z) e^{i(n_x a_x k_x + n_y a_y k_y)} \quad (2.117)$$

$$A_{n_z}^{(0)}(k_z) = \begin{cases} \sqrt{\frac{1}{N_x N_y (N_z + 1)}} & , \quad \mu = 0 \quad (\rho = -2) \\ (-1)^\mu \sqrt{\frac{2}{N_x N_y (N_z + 1)}} \cos(n_z + \frac{1}{2}) \frac{\pi \mu}{N_z + 1} & , \quad \mu = 1, 2, \dots, N_z , \end{cases} \quad (2.118)$$

odnosno

$$\delta A_{n_z}(k_x k_y k_z) = \frac{V_{k_x k_y \nu}^{q_x q_y, \nu+1} A_{n_z}^{\nu+1}}{E_\nu^{(0)} - E_{\nu+1}^{(0)}} + \frac{V_{k_x k_y \nu}^{q_x q_y, \nu-1} A_{n_z}^{\nu-1}}{E_\nu^{(0)} - E_{\nu-1}^{(0)}} . \quad (2.119)$$

Ovde su iskorišćene aproksimacije koje su takođe primenjene i u radu [50]. Osim toga, u popravci na multi koeficijent umesto cele sume, uzeti su samo prvi susedi oko maksimalne vrednosti talasnog vektora $\nu = \frac{\pi N_z}{N_z + 1}$, tj. $\mu = \nu \pm 1$ kao i $k_x = q_x$ i $k_y = q_y$.

Polazeći od izraza (2.116), može se naći verovatnoća raspodele elektrona po slojevima u slučaju dopiranog filma. Ova verovatnoća se dobija sumiranjem kvadrata modula $A_{n_x n_y n_z}^{(1)}(k_x k_y k_z)$ po svim vrednostima n_x i n_y i konačno iznosi

$$P_F(n_z) = \sum_{n_x n_y} |A_{n_x n_y n_z}^{(1)}(k_x k_y k_z)|^2 = \frac{2}{N_z + 1} \cos^2(n_z + \frac{1}{2}) \frac{\pi \nu}{N_z + 1} \times \quad (2.120)$$

$$\times \left[1 - \frac{V_\nu^{\nu-1} \cos(n_z + \frac{1}{2}) \frac{\pi}{N_z + 1} (\nu - 1)}{4 W_z \sin \frac{\pi}{2(N_z + 1)} \sin \frac{\pi}{N_z + 1} (\nu - \frac{1}{2}) \cos(n_z + \frac{1}{2}) \frac{\pi \nu}{N_z + 1}} \right]^2 ,$$

gde je matrični element interakcije u perturbovanim slojevima $V_\nu^{\nu-1}$ računat po stanjima oko maksimalnog talasnog vektora.

Polazeći od elektronskih stanja nulte aproksimacije, može se navedeni matrični element za Fermi elektrone ($\nu = N_z$) pisati u obliku

$$V_\nu^{\nu-1} = \frac{2\epsilon}{N_z + 1} \sum_{n_z=0}^{N_1} [2 \cos(n_z + \frac{1}{2}) y - \cos(n_z + \frac{3}{3}) y - \cos(n_z - \frac{1}{2}) y] \cos(n_z + \frac{1}{2}) x \quad (2.121)$$

$$y = \frac{\pi\nu}{N_z + 1} , \quad x = \frac{\pi(\nu - 1)}{N_z + 1} , \quad \nu = N_z .$$

Kraći zapis bi bio sledeći

$$V_{\nu}^{\nu-1} = \frac{2\epsilon}{N_z + 1}(2S_1 - S_2 - S_3) \quad (2.122)$$

gde su S_1 , S_2 i S_3 odgovarajuće sume u prethodnom izrazu.

Nakon relativno jednostavne sumacije, dobijaju se sledeći izrazi za odgovarajuće sume u sloju $[0, N_1]$

$$S_1 = \frac{1}{4} \left[\cos(N_1 + \frac{1}{2})(y + x) + \cos(N_1 + \frac{1}{2})(y - x) + \right. \quad (2.123)$$

$$\left. + \cot \frac{y+x}{2} \sin(N_1 + \frac{1}{2})(y + x) + \cot \frac{y-x}{2} \sin(N_1 + \frac{1}{2})(y - x) \right] ,$$

$$S_2 = \frac{1}{4} \left\{ \cos \frac{3y+x}{2} \left[1 + \frac{\sin(N_1 + \frac{1}{2})(y + x)}{\sin \frac{y+x}{2}} \right] - \frac{\sin \frac{3y+x}{2}}{\sin \frac{y+x}{2}} \left[\cos \frac{y+x}{2} - \right. \right. \quad (2.124)$$

$$\left. - \cos(N_1 + \frac{1}{2})(y - x) \right] + \cos \frac{3y-x}{2} \left[1 + \frac{\sin(N_1 + \frac{1}{2})(y - x)}{\sin \frac{y-x}{2}} \right] -$$

$$\left. \left. - \frac{\sin \frac{3y-x}{2}}{\sin \frac{y-x}{2}} \left[\cos \frac{y-x}{2} - \cos(N_1 + \frac{1}{2})(y - x) \right] \right\} , \right.$$

$$S_3 = \frac{1}{4} \left\{ \cos \frac{y-x}{2} \left[1 + \frac{\sin(N_1 + \frac{1}{2})(y + x)}{\sin \frac{y+x}{2}} \right] + \frac{\sin \frac{y-x}{2}}{\sin \frac{y+x}{2}} \left[\cos \frac{y+x}{2} - \right. \right. \quad (2.125)$$

$$\left. - \cos(N_1 + \frac{1}{2})(y + x) \right] + \cos \frac{y+x}{2} \left[1 + \frac{\sin(N_1 + \frac{1}{2})(y - x)}{\sin \frac{y-x}{2}} \right] +$$

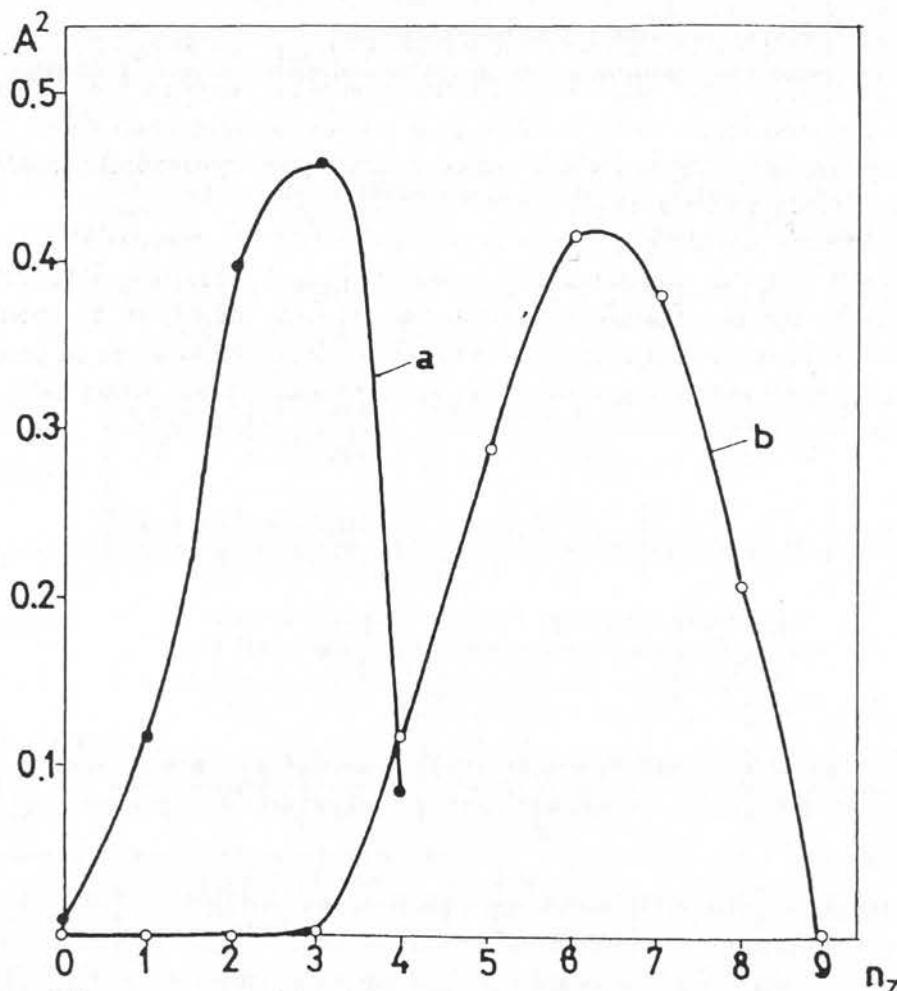
$$\left. \left. + \frac{\sin \frac{y+x}{2}}{\sin \frac{y-x}{2}} \left[\cos \frac{y-x}{2} - \cos(N_1 + \frac{1}{2})(y - x) \right] \right\} . \right.$$

U slučaju sloja $[N_2, N_z]$ dobijaju se na analogan način pripadne sume koje zbog glozalnosti neće biti eksplisitno date.

Lako je konstatovati da funkcija $P_F(n_z)$ u slučaju nedopiranog filma (tj. $\epsilon = \epsilon' = 0$), ima maksimum na sredini filma, dok su minimalne vrednosti (koje su jako bliske nuli) na graničnim površinama filma. Ovaj rezultat je u skladu sa činjenicom da su struje u perovskitskim slojevima [51]-[60] kod visokotemperaturnih superprovodnika lokalizovane u ravniima koje se nalaze u dubini sloja.

Na osnovu dobijenog analitičkog izraza za popravku (2.120), numerički je izvršena analiza prostorne elektronske raspodele [35] za petoslojnu, desetoslojnu strukturu i za deboe film od 1000 slojeva. Takode i u ovom slučaju osnovni cilj je bio pomeranje maksimuma elektronske distribucije ka granicama filma. Ispostavilo se da se pomeranje uvek vrši u smeru gde su potencijalne jame jon-jon interakcije pliće. Ovaj zaključak je

u izvesnom smislu kompatibilan sa idejama iz rada [61] gde se predviđa da bi doping negativnim jonima povećao kritičnu superprovodnu temperaturu. Doping negativnim jonom vodi na plićje jame ion-jon interakcije. Na sl. 2.3, predstavljene su prostorne raspodele elektrona za $\epsilon = 0.1$, $\epsilon' = -0.1$ i $k_x = \pi/a_x$, $k_y = \pi/a_y$ a $k_z = \frac{N}{N+1} \frac{\pi}{a_z}$. Takođe su posmatrane strukture sa pet i deset slojeva.



Slika 2.3. Raspodela elektronske gustine u petoslojnoj strukturi (a) i desetoslojnoj (b).

Sa slike se vidi da se maksimum elektronske gustine nalazi na prvom unutrašnjem sloju do graničnog sloja kada se radi o petoslojnoj strukturi. Kod desetoslojne strukture maksimum je dublje u filmu, tj. nalazi se na četvrtom sloju pre graničnog sloja. Vrlo interesantno je da količnik broja sloja na kome imamo maksimum elektronske gustine i ukupnog broja slojeva ostaje isti (u oba slučaja oko 0.7). Ovo pravilo konstantnosti pomenutog odnosa proveravano je na strukturi sa 100, 500 i 1000 slojeva i ispostavilo se da je odnos oko 0.7, naravno za vrednosti parametara $\epsilon = 0.1$ i $\epsilon' = -0.1$. Sa slike se takođe vidi da se maksimum pomera ka plićim jamama ion-jon interakcije, tj. ka kraju gde je perturbacija ϵ negativna.

Energije po slojevima su date sa

$$\begin{aligned} n_z \in [0, N_1] \quad , \quad E_1 &= E_0 + 5.95\epsilon \\ n_z \in (N_1, N_2) \quad , \quad E_0 & \\ n_z \in [N_2, N] \quad , \quad E_1 &= E_0 - 5.95\epsilon' \\ E_0 &= 4W_x + 4W_y + 2W_z(1 - \cos \frac{\pi N}{N+1}) . \end{aligned} \quad (2.126)$$

Vidi se da elektroni u jednom od perturbovanih delova zavisno od znaka perturbacije dobijaju ϵ , što može da utiče na superkonduktivnu kritičnu temperaturu. Pojava ϵ znači menjanje hemijskog potencijala a time i gustine stanja koja u BCS prilazu [62] bitno definiše veličinu kritične temperature.

Rezultati numeričke analize pokazuju da je predložen tip deformacije naparavanjem višestruko koristan:

- maksimum elektronske gustine pomera se ka granici,
- populacija je u ovom delu najveća (gušće struje) i
- hemijski potencijal postaje veći za iznos $5.95\epsilon'$ što povećava hemijski potencijal, a time i gustinu stanja.

Na kraju ove podsekcije treba istaći da su slične teorijske analize stanja slobodnih nosilaca struje izvršene u radu [63] i [64] i dobijeni su slični rezultati. Analize u radu [64] su zasnovane na rezultatima eksperimentalnih istraživanja sprovedenih u [65]. Ova eksperimentalna istraživanja su pokazala da se promena graničnih uslova može postići hemisorpcijom pozitivnih vodonikovih jona i time uticati na ponašanje slobodnih nosilaca struje u filmu. Ovo na neki način predstavlja dokaz da su granični uslovi bitno odgovorni za ponašanje nosilaca struje u tankim filmovima. U tom smislu, bilo bi poželjno da se eksperimentalno testiranje izvrši u ovom smjeru.

Glava III

3 Elektron-fonon interakcija u tankim filmovima

Postupno samosaglasno opisivanje svojstava elektron-fononskog sistema u metalima bezuslovno je jedno od centralnih i najvažnijih problema u fizici čvrstog stanja. Poznato je da elektron-fonon interakcija uslovljava takve kooperativne pojave kao što su efektivno privlačenje između dva elektrona u rešetki koje dovodi do obrazovanja Kuperovih parova i do pojave superprovodljivosti, pojave talasa gustine nanelektrisanja [66], autolokalizacije elektrona sa obrazovanjem polarona [67] i solitona [68], strukturalnih nestabilnosti itd. Takođe interakcija odnosno rasejanje elektrona na fononima dovodi do pojave električnog otpora.

Osnovni cilj ove glave jeste da se dobije samosaglasan opis tankog filma u prisustvu elektron-fonon interakcije. Najpre će biti formulisani hamiltonijani elektron-fonon interakcije za tanke metalne filmove. Na bazi toga biće procenjene kritične superkonduktivne temperature za filmove i odgovarajuće masivne strukture. U okviru istog modela biće razmatrana mogućnost za realizaciju superprovodnog stanja u tankim film-strukturama.

3.1 Hamiltonijan elektron-fonon interakcije

U prethodnoj glavi posmatrali smo elektronski sistem pri čemu smo prepostavili da je kristalna rešetka potpuno „zamrznuta” odnosno da joni praktično miruju. Ovu činjenicu da atomi osciluju oko svojih ravnotežnih položaja sada ćemo uzeti u obzir. Međutim, najpre pobliže istaknimo neke detalje. Naime, atome (jone) ćemo tretirati kao krute objekte koji ostaju takvi prilikom oscilovanja. Šta to pobliže znači? Uzmimo zbog jednostavnosti jedan „spoljašnji” elektron i ostatak atoma („jezgro”). Stanje i energetski nivo (E_n) tog elektrona ne određuje samo matično jezgro, već i okolni atomi.

Krutost znači da prilikom oscilovanja rešetke energetski nivo elektrona E_n na datom atomu se kontinuirano i sporo menja, tj. adijabatski prati promene okolnog kristalnog potencijala. Ta je prepostavka korektna uz uslov da su karakteristične frekvencije oscilovanja rešetke ω_{res} , puno manje od razlike energije E_n i prvog višeg kvantnog nivoa u koji bi elektron mogao preći. Drugim rečima elektroni su dovoljno brzi da skoro trenutno prilagode svoje stanje potencijalu. Dakle, oni niti prelaze na susedne jone (dok god zanemaruju integrante rezonantnog prekrivanja), niti se pobuđuju na viša stanja na vlastitom jonu - atom se ne polarizuje zbog oscilovanja rešetke.

Da bismo formulisali hamiltonijan elektron-fonon interakcije polazimo od izraza za elektronski hamiltonijan u idealnoj strukturi [69]. Hamiltonijan „zamrznute” strukture, prema [35] ima oblik

$$H = \sum_{\vec{n}\vec{m}} W_{\vec{n}\vec{m}} \alpha_{\vec{n}}^+ \alpha_{\vec{n}} - \sum_{\vec{n}\vec{m}} W_{\vec{n}\vec{m}} \alpha_{\vec{n}}^+ \alpha_{\vec{m}} . \quad (3.1)$$

gde su $\alpha_{\vec{n}}^+$ ($\alpha_{\vec{n}}$) Fermi-operatori koji kreiraju (anihiliraju) elektrone na čvoru \vec{n} , dok su sa $W_{\vec{n}\vec{m}} = W_{\vec{m}\vec{n}} \equiv W_{\vec{n}-\vec{m}}$ obeleženi integrali rezonantnog prekrivanja²⁴.

²⁴U disertaciji će se koristiti i drugi naziv za ove matrične elemente: jon-jon interakcije.

Na temperaturama različitim od nule odnosno usled zagrevanja ili mehaničkog dejstva, atomi (molekuli ili joni) kristalne rešetke se pomeraju iz (oko) ravnotežnog položaja \vec{n} i \vec{m} , što se može izraziti kao

$$\vec{n} \rightarrow \vec{n} + \vec{u}_{\vec{n}} ; \quad \vec{m} \rightarrow \vec{m} + \vec{u}_{\vec{m}} , \quad (3.2)$$

gde su $\vec{u}_{\vec{n}}$ i $\vec{u}_{\vec{m}}$ odgovarajući fononski pomeraji jona iz ravnotežnog položaja \vec{n} i \vec{m} . U modelu jake veze [70] može se smatrati da se pri pomeranju jona iz položaja ravnoteže menjaju samo rezonantni integrali $W_{\vec{n}-\vec{m}}$. Ako prepostavimo da su pomeraji čvorova rešetke mali (što je realno na relativno niskim temperaturama), onda se veličina $W_{\vec{n}-\vec{m}}$ može razviti u Taylorov red (oko ravnotežnog položaja) tako da u linearnoj aproksimaciji po pomerajima možemo pisati

$$W_{\vec{n}-\vec{m}} \rightarrow W_{\vec{n}-\vec{m}+(\vec{u}_{\vec{n}}-\vec{u}_{\vec{m}})} \approx W_{\vec{n}-\vec{m}} + (\vec{u}_{\vec{n}} - \vec{u}_{\vec{m}}) \nabla_{\vec{n}-\vec{m}} W_{\vec{n}-\vec{m}} . \quad (3.3)$$

Na taj način, ako izostavimo elektronski hamiltonijan (kada se joni nalaze u svojim ravnotežnim položajima), dolazimo do hamiltonijana elektron-fonon interakcije

$$H_{int} = H_{int}^{(I)} + H_{int}^{(II)} , \quad (3.4)$$

gde je

$$H_{int}^{(I)} = \sum_{\vec{n}\vec{m}} (\vec{u}_{\vec{n}} - \vec{u}_{\vec{m}}) \nabla_{\vec{n}-\vec{m}} W_{\vec{n}-\vec{m}} \alpha_{\vec{n}}^+ \alpha_{\vec{n}}^- , \quad (3.5)$$

i

$$H_{int}^{(II)} = - \sum_{\vec{n}\vec{m}} (\vec{u}_{\vec{n}} - \vec{u}_{\vec{m}}) \nabla_{\vec{n}-\vec{m}} W_{\vec{n}-\vec{m}} \alpha_{\vec{n}}^+ \alpha_{\vec{m}}^- . \quad (3.6)$$

Hamiltonijani (3.5) i (3.6) zapisani su preko gradijenta jon-jon interakcije zbog toga što u filmu zbog narušene diskretne translacione simetrije treba strogo kontrolisati položaje atoma, a to (3.5) i (3.6) pošto su dati u konfiguracionoj reprezentaciji omogućuju.

U literaturi je uobičajeno [71] da se za masivne strukture izvrši Furije-transformacija jon-jon interakcije i da se razvije u red odgovarajući eksponent

$$\begin{aligned} W_{\vec{n}-\vec{m}+\vec{u}_{\vec{n}}-\vec{u}_{\vec{m}}} &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} W_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m}) + i\vec{k}\vec{u}_{\vec{n}} - i\vec{u}_{\vec{m}}} \approx \\ &\approx \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} W_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})} + \frac{i}{N} \sum_{\vec{k}} (\vec{u}_{\vec{n}} - \vec{u}_{\vec{m}}) \vec{k} W_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})} . \end{aligned}$$

Uključivanjem drugog člana gornjeg izraza u hamiltonijan H_{int} dobijamo hamiltonijan elektron-fonon interakcije. Ovaj put je prostiji ali ne dopušta punu kontrolu atomskih pozicija koja je za film neophodna jer se u filmu parametri oko graničnih površina razlikuju od zapreminskih parametara.

U skladu sa već korišćenom aproksimacijom najbližih suseda, za integrale transfera $W_{\vec{n}-\vec{m}}$ elektrona sa čvora \vec{n} na čvor \vec{m} možemo uvesti sledeće oznake

$$\begin{aligned} W_{n_x n_y n_z; n_x \pm 1 n_y n_z} &= W_x(a_x) \equiv W_x \\ W_{n_x n_y n_z; n_x n_y \pm 1 n_z} &= W_y(a_y) \equiv W_y \end{aligned} \quad (3.7)$$

$$W_{n_x n_y n_z; n_x n_y n_z \pm 1} = W_z(a_z) \equiv W_z .$$

Takođe u aproksimaciji najblžih suseda gradjeni su dati sa

$$\begin{aligned}\nabla_{n_x n_y n_z; n_x \pm 1 n_y n_z} &= \mp i \vec{i} \frac{\partial}{\partial a_x}, \\ \nabla_{n_x n_y n_z; n_x n_y \pm 1 n_z} &= \mp j \vec{j} \frac{\partial}{\partial a_y}, \\ \nabla_{n_x n_y n_z; n_x n_y n_z \pm 1} &= \mp k \vec{k} \frac{\partial}{\partial a_z} .\end{aligned}\quad (3.8)$$

Na osnovu (3.7) i (3.8) hamiltonijan elektron-fonon interakcije (3.4) za masivnu strukturu može se zapisati u obliku

$$H_{int}^{(B)} = H_{int}^{(I)} + H_{int}^{(II)} \quad (3.9)$$

gde je

$$H_{int}^{(I)} = \sum_{n_j \gamma} \frac{\partial W_\gamma}{\partial a_\gamma} \left(\vec{u}_{n+\lambda_\gamma}^j - \vec{u}_{n-\lambda_\gamma}^j \right)_\gamma \alpha_n^+ \alpha_n^- \quad (3.10)$$

$$H_{int}^{(II)} = - \sum_{n_j \gamma} \frac{\partial W_\gamma}{\partial a_\gamma} \left[\left(\vec{u}_{n+\lambda_\gamma}^j - \vec{u}_{n-\lambda_\gamma}^j \right)_\gamma \alpha_n^+ \alpha_{n+\lambda_\gamma}^- + \left(\vec{u}_{n-\lambda_\gamma}^j - \vec{u}_{n+\lambda_\gamma}^j \right)_\gamma \alpha_n^+ \alpha_{n-\lambda_\gamma}^- \right] . \quad (3.11)$$

Gore uvedene oznake su sledeće

$$\begin{aligned}n &= (n_x, n_y, n_z); \quad \gamma = (x, y, z) \\ n \pm \lambda_x &\equiv (n_x \pm 1, n_y, n_z) \\ n \pm \lambda_y &\equiv (n_x, n_y \pm 1, n_z) \\ n \pm \lambda_z &\equiv (n_x, n_y, n_z \pm 1) .\end{aligned}\quad (3.12)$$

dok indeks j označava fononsku granu kod kojih je za datu prostu strukturu, jedna longitudinalna i dve transverzalne.

Hamiltonijan interakcije (3.9) napisan na ovaj način striktno govoreći važi za masivnu strukturu. Međutim, on se takođe može koristiti i za analizu struktura sa narušenom simetrijom kao što su tanki kristali (popularno tanki filmovi).

3.2 Hamiltonijan elektron-fonon interakcije za film

Prilikom formiranja hamiltonijana elektron-fonon interakcije za film, treba voditi računa o tome da jon-jon interakcije u graničnim slojevima trpe promene. Pretpostavimo da su promene u unutrašnjim slojevima zanemarive. Na osnovu ovoga što je rečeno možemo

pisati

$$W_{n_x n_y 0; n_x \pm 1 n_y 0} = W_x^{(0)} ; \quad W_{n_x n_y N_z; n_x \pm 1 n_y N_z} = W_x^{(N)} ,$$

$$W_{n_x n_y 0; n_x n_y \pm 10} = W_y^{(0)} ; \quad W_{n_x n_y N_z; n_x n_y \pm 1 N_z} = W_y^{(N)} ,$$

$$W_{n_x n_y 0; n_x n_y 1} = W_{n_x n_y 1; n_x n_y 0} = W_z^{(0)} ,$$

$$W_{n_x n_y N_z; n_x n_y N_z - 1} = W_{n_x n_y N_z - 1; n_x n_y N_z} = W_z^{(N)} ,$$

$$W_{n_x n_y 0; n_x n_y -1} = W_{n_x n_y N_z; n_x n_y N_z + 1} = 0 ,$$

$$W_{n_x n_y n_z; n_x \pm 1 n_y n_z} = W_x ; \quad W_{n_x n_y n_z; n_x n_y \pm 1 n_z} = W_y , \quad n_z = 1, 2, \dots, N_z - 1 ,$$

$$W_{n_x n_y n_z; n_x n_y n_z \pm 1} = W_z , \quad n_z = 2, 3, \dots, N_z - 2 ,$$

$$\begin{aligned} & \text{za } n_z = 0 ; \quad m_z = -1 , \quad + \frac{\partial W_z}{\partial a_z} = 0 , \quad \text{za } n_z = 0 ; \quad m_z = 1 , \quad - \frac{\partial W_z}{\partial a_z} = - \frac{\partial W_z^{(0)}}{\partial a_z} \\ & \text{za } n_z = N_z ; \quad m_z = N_z - 1 , \quad + \frac{\partial W_z}{\partial a_z} = + \frac{\partial W_z^{(N)}}{\partial a_z} \\ & \text{za } n_z = N_z ; \quad m_z = N_z + 1 , \quad - \frac{\partial W_z}{\partial a_z} = 0 . \end{aligned} \tag{3.13}$$

S obzirom na (3.13) hamiltonijan elektron-fonon interakcije u filmu može se zapisati kao

$$H_{int}^{(F)}(j) = H_{SS}^{(I)}(j) + H_{SS}^{(II)}(j) + H_{SV}^{(I)}(j) + H_{SV}^{(II)}(j) + H_{VV}^{(I)}(j) + H_{VV}^{(II)}(j) . \tag{3.14}$$

Izrazi za pojedine delove $H_{int}^{(F)}(j)$ su sledeći

$$\begin{aligned} H_{SS}^{(I)}(j) = & \sum_{n_x n_y} \{ [(\vec{u}_{n_x+1 n_y 0}^j - \vec{u}_{n_x-1 n_y 0}^j)_x \frac{\partial W_x^{(0)}}{\partial a_x} + (\vec{u}_{n_x n_y + 10}^j - \vec{u}_{n_x n_y - 10}^j)_y \frac{\partial W_y^{(0)}}{\partial a_y} + \\ & + (\vec{u}_{n_x n_y 1}^j - \vec{u}_{n_x n_y 0}^j)_z \frac{\partial W_z^{(0)}}{\partial a_z}] \alpha_{n_x n_y 0}^+ \alpha_{n_x n_y 0}^- + \\ & + [(\vec{u}_{n_x+1 n_y N_z}^j - \vec{u}_{n_x-1 n_y N_z}^j)_x \frac{\partial W_x^{(N)}}{\partial a_x} + (\vec{u}_{n_x n_y + 1 N_z}^j - \vec{u}_{n_x n_y - 1 N_z}^j)_y \frac{\partial W_y^{(N)}}{\partial a_y} + \\ & + (\vec{u}_{n_x n_y N_z}^j - \vec{u}_{n_x n_y N_z - 1}^j)_z \frac{\partial W_z^{(N)}}{\partial a_z}] \alpha_{n_x n_y N_z}^+ \alpha_{n_x n_y N_z}^- \} \end{aligned} \tag{3.15}$$

$$\begin{aligned}
H_{SS}^{(II)}(j) = & - \sum_{n_x n_y} \langle \alpha_{n_x n_y 0}^+ \{ - \frac{\partial W_x^{(0)}}{\partial a_x} [(\vec{u}_{n_x+1 n_y 0}^j - \vec{u}_{n_x n_y 0}^j)_x \alpha_{n_x+1 n_y 0} - \\
& - (\vec{u}_{n_x-1 n_y 0}^j - \vec{u}_{n_x n_y 0}^j)_x \alpha_{n_x-1 n_y 0}] + \\
& + \frac{\partial W_y^{(0)}}{\partial a_y} [(\vec{u}_{n_x n_y+10}^j - \vec{u}_{n_x n_y 0}^j)_y \alpha_{n_x n_y+10} - \\
& - (\vec{u}_{n_x n_y-10}^j - \vec{u}_{n_x n_y 0}^j)_y \alpha_{n_x n_y-10}] + \\
& + \frac{\partial W_z^{(0)}}{\partial a_z} (\vec{u}_{n_x n_y 1}^j - \vec{u}_{n_x n_y 0}^j)_z \alpha_{n_x n_y 1} \} + \\
& + \alpha_{n_x n_y N_z}^+ \{ \frac{\partial W_x^{(N)}}{\partial a_x} [(\vec{u}_{n_x+1 n_y N_z}^j - \vec{u}_{n_x n_y N_z}^j)_x \alpha_{n_x+1 n_y N_z} - \\
& - (\vec{u}_{n_x-1 n_y N_z}^j - \vec{u}_{n_x n_y N_z}^j)_x \alpha_{n_x-1 n_y N_z}] + \\
& + \frac{\partial W_y^{(N)}}{\partial a_y} [(\vec{u}_{n_x n_y+1 N_z}^j - \vec{u}_{n_x n_y N_z}^j)_y \alpha_{n_x n_y+1 N_z} - \\
& - (\vec{u}_{n_x n_y-1 N_z}^j - \vec{u}_{n_x n_y N_z}^j)_y \alpha_{n_x n_y-1 N_z}] + \\
& + \frac{\partial W_z^{(N)}}{\partial a_z} (\vec{u}_{n_x n_y N_z}^j - \vec{u}_{n_x n_y N_z-1}^j)_z \alpha_{n_x n_y N_z-1} \} \} , \tag{3.16}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_{SV}^{(I)}(j) = & \sum_{n_x n_y} \{ [(\vec{u}_{n_x+1 n_y 1}^j - \vec{u}_{n_x-1 n_y 1}^j)_x \frac{\partial W_x}{\partial a_x} + (\vec{u}_{n_x n_y+11}^j - \vec{u}_{n_x n_y-11}^j)_y \frac{\partial W_y}{\partial a_y} - \\
& - (\vec{u}_{n_x n_y 1}^j - \vec{u}_{n_x n_y 0}^j)_z \frac{\partial W_z^{(0)}}{\partial a_z} - (\vec{u}_{n_x n_y 2}^j - \vec{u}_{n_x n_y 1}^j)_z \frac{\partial W_z}{\partial a_z}] \alpha_{n_x n_y 1}^+ \alpha_{n_x n_y 1} + \\
& + [(\vec{u}_{n_x+1 n_y N_z-1}^j - \vec{u}_{n_x-1 n_y N_z-1}^j)_x \frac{\partial W_x}{\partial a_x} + \\
& + (\vec{u}_{n_x n_y+1 N_z-1}^j - \vec{u}_{n_x n_y-1 N_z-1}^j)_y \frac{\partial W_y}{\partial a_y} + \\
& + (\vec{u}_{n_x n_y N_z-1}^j - \vec{u}_{n_x n_y N_z}^j)_z \frac{\partial W_z^{(N)}}{\partial a_z} - \\
& - (\vec{u}_{n_x n_y N_z-1}^j - \vec{u}_{n_x n_y N_z-2}^j)_z \frac{\partial W_z}{\partial a_z}] \alpha_{n_x n_y N_z-1}^+ \alpha_{n_x n_y N_z-1} \} , \tag{3.17}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_{SV}^{(II)}(j) = & - \sum_{n_x n_y} \langle \alpha_{n_x n_y 1}^+ \{ \frac{\partial W_x}{\partial a_x} [(\vec{u}_{n_x+1 n_y 1}^j - \vec{u}_{n_x n_y 1}^j)_x \alpha_{n_x+1 n_y 1} - \\
& - (\vec{u}_{n_x-1 n_y 1}^j - \vec{u}_{n_x n_y 1}^j)_x \alpha_{n_x-1 n_y 1}] + \\
& + \frac{\partial W_y}{\partial a_y} [(\vec{u}_{n_x n_y+1 1}^j - \vec{u}_{n_x n_y 1}^j)_y \alpha_{n_x n_y+1 1} - \\
& - (\vec{u}_{n_x n_y-1 1}^j - \vec{u}_{n_x n_y 1}^j)_y \alpha_{n_x n_y-1 1}] + \\
& + \frac{\partial W_z}{\partial a_z} (\vec{u}_{n_x n_y 2}^j - \vec{u}_{n_x n_y 1}^j)_z \alpha_{n_x n_y 2} - \\
& - \frac{\partial W_z^{(0)}}{\partial a_z} (\vec{u}_{n_x n_y 0}^j - \vec{u}_{n_x n_y 1}^j)_z \alpha_{n_x n_y 0} \} + \\
& + \alpha_{n_x n_y N_z-1}^+ \{ \frac{\partial W_x}{\partial a_x} [(\vec{u}_{n_x+1 n_y N_z-1}^j - \vec{u}_{n_x n_y N_z-1}^j)_x \alpha_{n_x+1 n_y N_z-1} - \\
& - (\vec{u}_{n_x-1 n_y N_z-1}^j - \vec{u}_{n_x n_y N_z-1}^j)_x \alpha_{n_x-1 n_y N_z-1}] + \\
& + \frac{\partial W_y}{\partial a_y} [(\vec{u}_{n_x n_y+1 N_z-1}^j - \vec{u}_{n_x n_y N_z-1}^j)_y \alpha_{n_x n_y+1 N_z-1} - \\
& - (\vec{u}_{n_x n_y-1 N_z-1}^j - \vec{u}_{n_x n_y N_z-1}^j)_y \alpha_{n_x n_y-1 N_z-1}] + \\
& + \frac{\partial W_z^{(N)}}{\partial a_z} (\vec{u}_{n_x n_y N_z}^j - \vec{u}_{n_x n_y N_z-1}^j)_z \alpha_{n_x n_y N_z} - \\
& - \frac{\partial W_z}{\partial a_z} (\vec{u}_{n_x n_y N_z-2}^j - \vec{u}_{n_x n_y N_z-1}^j)_z \alpha_{n_x n_y N_z-2} \} \} , \quad (3.18)
\end{aligned}$$

$$H_{VV}^{(I)} = \sum_{n_x n_y} \sum_{n_z=2}^{N_z-2} \sum_{j\gamma} \frac{\partial W_\gamma}{\partial a_\gamma} (\vec{u}_{n+\lambda_\gamma}^j - \vec{u}_{n-\lambda_\gamma}^j)_\gamma \alpha_n^+ \alpha_n ; \quad n \equiv (n_x n_y n_z) \quad (3.19)$$

$$\begin{aligned}
H_{VV}^{(II)} = & - \sum_{n_x n_y} \sum_{n_z=2}^{N_z-2} \sum_{j\gamma} \frac{\partial W_\gamma}{\partial a_\gamma} \left[(\vec{u}_{n+\lambda_\gamma}^j - \vec{u}_{n_\gamma}^j)_\gamma \alpha_n^+ \alpha_{n+\lambda_\gamma} + \right. \\
& \left. + (\vec{u}_{n-\lambda_\gamma}^j - \vec{u}_{n_\gamma}^j)_\gamma \alpha_n^+ \alpha_{n-\lambda_\gamma} \right] , \quad n \equiv (n_x n_y n_z) . \quad (3.20)
\end{aligned}$$

Kao što se vidi hamiltonijan elektron-fonon interakcije u filmu ima nekoliko karakterističnih delova koji su navedeni u gornjim formulama. Videćemo kasnije da osnovne doprinose konstanti elektron-fonon interakcije daju granični delovi ukupnog hamiltonijana. Da bi ovo bilo što očiglednije nismo ni pokušavali da ih pišemo u kraćoj formi preko neke posebne simbolike. Simbolika bi bila dosta komplikovana i zamagljivala bi račun.

Sada možemo da hamiltonijan masivne strukture (3.9) zapišemo u impulsnom pros-

toru (de fakto u prostoru talasnih vektora). Prelazak u impulsni prostor vrši se Furije-transformacijom elektronskih operatora $\alpha_{\vec{n}}(\alpha_{\vec{n}}^+)$ i operatora vektora pomeraja $\vec{u}_{\vec{n}}$ atoma iz čvora \vec{n} respektivno, na sledeći način

$$\begin{aligned} \alpha_{n_x n_y n_z} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k_x k_y k_z} \alpha_{k_x k_y k_z} e^{i(n_x a_x k_x + n_y a_y k_y + n_z a_z k_z)}, \\ (\vec{u}_{n_x n_y n_z}^j)_{\gamma} &= \sum_{k_x k_y k_z} \sqrt{\frac{h}{2 M N_x N_y N_z \omega_j(k_x k_y k_z)}} [\vec{l}_j(k_x k_y k_z)]_{\gamma} \times \\ &\quad \times (b_{j; k_x k_y k_z} + b_{j; -k_x, -k_y, -k_z}^+) e^{i(n_x a_x q_x + n_y a_y q_y + n_z a_z q_z)}. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Sistem svojstvenih vektora $\vec{l}_j(q_x q_y q_z)$ koji odgovaraju fononskoj frekvenciji $\omega_j(q_x q_y q_z)$ nazivaju se vektorima polarizacije. Oni zadovoljavaju uslov ortogonalnosti i potpunosti

$$\sum_{\gamma} \vec{l}_j^{*\gamma}(q_x q_y q_z) \vec{l}_{j'}^{\gamma}(q_x q_y q_z) = \delta_{jj'}; \quad \sum_j \vec{l}_j^{\gamma}(q_x q_y q_z) \vec{l}_{j'}^{\gamma'}(q_x q_y q_z) = \delta_{\gamma\gamma'}. \quad (3.22)$$

Na taj način hamiltonijan (3.9) se prevodi u

$$\begin{aligned} H_{int}^{(B)}(j) &= H_{int}^{(I)}(j) + H_{int}^{(II)}(j) = 8i\sqrt{\frac{h}{2MN}} \sum_{k_x k_y k_z} \sum_{q_x q_y q_z} \sum_{\gamma} \frac{\partial W_{\gamma}}{\partial a_{\gamma}} \frac{[\vec{l}_j(q_x q_y q_z)]_{\gamma}}{\sqrt{\omega_j(q_x q_y q_z)}} \times \\ &\quad \times \sin \frac{k_{\gamma} a_{\gamma}}{2} \sin \frac{q_{\gamma} a_{\gamma}}{2} \sin \frac{(k_{\gamma} + q_{\gamma}) a_{\gamma}}{2} \alpha_{k_x + q_x, k_y + q_y, k_z + q_z}^+ \alpha_{k_x k_y k_z} (b_{j; q_x q_y q_z} + b_{j; -q_x, -q_y, -q_z}^+), \\ &\quad N = N_x N_y N_z. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Iz ovog izraza vidimo da je, pojednostavljeni operator fononskog pomaka $b_{j; q_x q_y q_z} + b_{j; -q_x, -q_y, -q_z}^+$ vezan sa $\vec{q} \equiv (q_x q_y q_z)$ -komponentom operatora gustine elektrona,

$$\rho_{-\vec{q}} = \sum_{\vec{k}} \alpha_{\vec{k} + \vec{q}}^+ \alpha_{\vec{k}}.$$

Naravno, ta gustina postaje konačna zbog preraspodele elektrona. Često se pak zavisnost u konstanti veze $F_j(\vec{k}, \vec{q})$ (koja stoji ispred operatora u (3.23)) može zanemariti ili izvršiti odgovarajuća usrednjavanja koja će u sledećem paragrafu i biti izvršena.

Što se tiče filma treba se podsetiti da u njemu mogu da postoje dva tipa stanja i to zapreminska i površinska i za elektrone i za fonone. Zbog toga u tankom filmu postoji više različitih interakcija elektrona sa fononima i samim tim nekoliko tipova hamiltonijana interakcije koji se dobijaju kombinovanjem elektronskih i fononskih operatora za navedena stanja. U filmu uvek postoji interakcija zapreminskih elektrona sa zapreminskim fononima ali ako se pojavljuju i površinska elektronska i fononska stanja onda se interakcije mogu kombinovati: površinski elektroni - površinski fononi, površinski elektroni - zapreminski fononi i zapreminski elektroni - površinski fononi. Pošto ovi hamiltonijani zauzimaju mnogo prostora ovde će biti naveden hamiltonijan interakcije zapreminskih

elektrona sa zapreminskim fononima i hamiltonijan interakcije površinskih elektrona sa zapreminskim fononima.

Da bi se dobio hamiltonijan interakcije zapreminskih elektrona sa zapreminskim fononima koristićemo transformaciju za zapreminske elektrone iz [35] i to u nultoj aproksimaciji

$$\alpha_{n_x n_y n_z} = \sum_{k_x k_y \mu=0}^{N_z} (-1)^\mu \sqrt{\frac{2}{N_x N_y (N_z + 1)}} e^{i(n_x a_x k_x + n_y a_y k_y)} \cos \left[(n_z + \frac{1}{2}) \frac{\pi \mu}{N_z + 1} \right], \quad (3.24)$$

$$a_z k_z = \frac{\pi \mu}{N_z + 1}, \quad \mu = 0, 1, \dots, N_z$$

i izraz za atomske pomeraje predstavljen preko zapreminskih fonona (takođe uzet u nultoj aproksimaciji) [17]

$$(\vec{u}_{n_x n_y n_z}^j)_\gamma = \sum_{q_x q_y} \sum_{\nu=1}^{N_z+1} (-1)^{n_z} \sqrt{\frac{\hbar}{M N_x N_y (N_z + 2) \omega_j (q_x q_y q_z)}} [l_j(q_x q_y q_z)]_\gamma \times$$

$$\times (b_{j; q_x q_y q_z} + b_{j; -q_x, -q_y, q_z}^+) e^{i(n_x a_x q_x + n_y a_y q_y)} \sin(n_z + 1) \frac{\pi \nu}{N_z + 2} \quad (3.25)$$

$$a_z q_z = \frac{\pi \nu}{N_z + 2}, \quad \nu = 1, 2, \dots, N_z + 1.$$

U nultoj aproksimaciji elektronska i fononska stanja su ortogonalna jer se preko njih dijagonalizuju elektronski i fononski hamiltonijani [17], [35]. Što se tiče hamiltonijana interakcije, zamena (3.24) i (3.25) u (3.14) (u (3.14) je uzeto $W^{(0)}, W^{(N)} \approx W$) nije dovela do kronekerovog simbola po z -komponentama talasnog vektora, što znači da impuls nije održan.

Zbog toga je korišćena *homogena* aproksimacija [69], koja se sastoji u sledećem

$$\sum_{n_z k_z q_z p_z} f(n_z, k_z, q_z, p_z) \alpha_{k_x + q_x, k_y + q_y, p_z}^+ \alpha_{k_x k_y k_z} b_{q_x q_y q_z} \approx$$

$$\approx \sum_{n_z k_z q_z} f(n_z, k_z, q_z, k_z + q_z) \alpha_{k_x + q_x, k_y + q_y, k_z + q_z}^+ \alpha_{k_x k_y k_z} b_{q_x q_y q_z} \quad (3.26)$$

što znači da su zadržani samo članovi u kojima se održava impuls. Veoma važno je uočiti da atomski pomeraj (3.25) u filmu menja znak od sloja do sloja i zbog toga suma po slojevima u kojoj se on javlja kao faktor nije proporcionalna broju slojeva, kako bi to bilo kad znak ne bi bio alternativan. Pošto znak pomeraja u masivnoj strukturi nije alternativan, doprinos od sumiranja po z -pravcu je proporcionalan broju slojeva N_z . Zbog toga se može naslutiti da je interakcija zapreminskih elektrona sa zapreminskim fononima manje izražena u filmu nego u masivnoj strukturi.

Gornje tvrđenje se može relativno lako i dokazati nalaženjem sledeće sume

$$\Sigma(\alpha, \beta, \gamma, N_z) = \sum_{n_z=0}^{N_z} (-1)^{n_z} \sin(n_z + 1) \alpha \cos(n_z + \frac{1}{2}) \beta \cos(n_z + \frac{1}{2}) \gamma. \quad (3.27)$$

Primenom formule

$$\sin x \sin y \sin z = \frac{1}{4} [\sin(x + y + z) + \sin(x + y - z) + \sin(x - y + z) + \sin(x - y - z)] \quad (3.28)$$

gornja suma se može napisati kao zbir četiri sume. Korišćenjem formule

$$\sum_{n=0}^N (-1)^n \sin(nX + Y) = \frac{1}{2 \cos \frac{X}{2}} \left[\sin(Y - \frac{X}{2}) + (-1)^N \sin(XN + Y + \frac{X}{2}) \right] \quad (3.29)$$

za svaku od te četiri sume konačno se za (3.27) dobija sledeći izraz:

$$\begin{aligned} \Sigma(\alpha, \beta, \gamma, N) &= \frac{1}{8 \cos \frac{\alpha+\beta+\gamma}{2}} \left[\sin \frac{\alpha}{2} + (-1)^N \sin[(N+1)(\alpha+\beta+\gamma) + \frac{\alpha}{2}] \right] + \\ &+ \frac{1}{8 \cos \frac{\alpha+\beta-\gamma}{2}} \left[\sin \frac{\alpha}{2} + (-1)^N \sin[(N+1)(\alpha+\beta-\gamma) + \frac{\alpha}{2}] \right] + \\ &+ \frac{1}{8 \cos \frac{\alpha-\beta+\gamma}{2}} \left[\sin \frac{\alpha}{2} + (-1)^N \sin[(N+1)(\alpha-\beta+\gamma) + \frac{\alpha}{2}] \right] + \\ &+ \frac{1}{8 \cos \frac{\alpha-\beta-\gamma}{2}} \left[\sin \frac{\alpha}{2} + (-1)^N \sin[(N+1)(\alpha-\beta-\gamma) + \frac{\alpha}{2}] \right]. \end{aligned} \quad (3.30)$$

Numeričkom analizom poslednje formule pokazano je da je taj izraz praktično uvek različit od nule ako važi sledeća veza

$$\alpha + \beta = \gamma ,$$

dok je u ostalim slučajevima zanemariv i gotovo uvek jednak nuli. Ovo može poslužiti kao dokaz i potvrda opravdanosti gore uvedene homogene aproksimacije.

Posle zamene (3.24) i (3.25) u (3.14) hamiltonijan elektron-fonon interakcije u filmu se može zapisati kao

$$H_{int}^{(F)}(j) = H_{SS}^{(F)}(j) + H_{SV}^{(F)}(j) + H_{VV}^{(F)}(j) . \quad (3.31)$$

Kao što se vidi hamiltonijan je nešto prestrukturiran u odnosu na formu koju ima u konfiguracionoj reprezentaciji, ali je takvo prestrukturiranje celishodno zbog procene doprinosu pojedinih delova iz (3.31).

Konačan izraz za hamiltonijan elektron-fonon interakcije nultog sloja može biti zapisan na sledeći način

$$H_{SS}^{(F)}(j) = H_{SS}^{(1)}(j) + H_{SS}^{(2)}(j) , \quad n_z = 0 \quad (3.32)$$

gde je

$$\begin{aligned} H_{SS}^{(1)}(j) &= 16i \sqrt{\frac{h}{MN_x N_y (N_z + 1)^3}} \frac{N_z + 1}{N_z + 2} \sum_{k_x k_y k_z} \sum_{q_x q_y q_z} \sum_{\gamma} \frac{\partial W_{\gamma}^{(0)}}{\partial \alpha_{\gamma}} \frac{[\vec{l}_j(q_x q_y q_z)]_{\gamma}}{\sqrt{\omega_j(q_x q_y q_z)}} \times \\ &\times (-1)^{\nu} \sin \frac{k_{\gamma} a_{\gamma}}{2} \sin \frac{q_{\gamma} a_{\gamma}}{2} \sin \frac{(k_{\gamma} + q_{\gamma}) a_{\gamma}}{2} \sin a_z q_z \cos \frac{a_z k_z}{2} \cos \frac{(k_z + q_z) a_z}{2} \times \\ &\times \alpha_{k_x + q_x, k_y + q_y, k_z + q_z}^+ \alpha_{k_x k_y k_z} (b_{j; q_x q_y q_z} + b_{j; -q_x, -q_y, q_z}^+) , \end{aligned} \quad (3.33)$$

odnosno

$$\begin{aligned}
 H_{SS}^{(2)}(j) = & -8 \sqrt{\frac{\hbar}{MN_x N_y (N_z + 1)^3}} \frac{N_z + 1}{N_z + 2} \sum_{k_x k_y k_z} \sum_{q_x q_y q_z} \frac{\partial W_z^{(0)}}{\partial a_z} \frac{[\vec{l}_j(q_x q_y q_z)]_z}{\sqrt{\omega_j(q_x q_y q_z)}} \times \\
 & \times (-1)^\nu \sin a_z k_z \sin \frac{a_z k_z}{2} \sin \frac{3a_z q_z}{2} \cos \frac{a_z q_z}{2} \cos \frac{(k_z + q_z)a_z}{2} \times \\
 & \times \alpha_{k_x + q_x, k_y + q_y, k_z + q_z}^+ \alpha_{k_x k_y k_z} (b_{z; q_x q_y q_z} + b_{z; -q_x, -q_y, q_z}^+) . \tag{3.34}
 \end{aligned}$$

Uvedene su sledeće označke

$$\gamma = (x, y) \quad i \quad \sum_{q_z} \leftrightarrow \sum_{\nu=1}^{N_z+1} ; \quad \alpha_z q_z = \frac{\pi \nu}{N_z + 2} , \quad \nu = 1, 2, \dots, N_z + 1 . \tag{3.35}$$

Hamiltonijan za sloj $n_z = N_z$, dobija se iz hamiltonijana za $n_z = 0$ tako što se faktor $(-1)^\nu$ za $n_z = 0$, zamenjuje faktorom $(-1)^{\nu+N_z+1}$ za $n_z = N_z$. Naravno $\frac{\partial W_\gamma^{(0)}}{\partial a_\gamma} \rightarrow \frac{\partial W_\gamma^{(N)}}{\partial a_\gamma}$; $\gamma = (x, y, z)$.

Sličnom procedurom, dobijamo hamiltonijan za sloj $n_z = 1$. On može biti napisan kao

$$H_{SV}^{(F)}(j) = H_{SV}^{(1)}(j) + H_{SV}^{(2)}(j) , \quad n_z = 1 \tag{3.36}$$

pri čemu je

$$\begin{aligned}
 H_{SV}^{(1)}(j) = & 16i \sqrt{\frac{\hbar}{MN_x N_y (N_z + 1)^3}} \frac{N_z + 1}{N_z + 2} \sum_{k_x k_y k_z} \sum_{q_x q_y q_z} \sum_{\gamma} \frac{\partial W_\gamma}{\partial a_\gamma} \frac{[\vec{l}_j(q_x q_y q_z)]_\gamma}{\sqrt{\omega_j(q_x q_y q_z)}} \times \\
 & \times (-1)^{\nu+1} \sin \frac{k_\gamma a_\gamma}{2} \sin \frac{q_\gamma a_\gamma}{2} \sin \frac{(k_\gamma + q_\gamma)a_\gamma}{2} \sin 2a_z q_z \cos \frac{3a_z k_z}{2} \cos \frac{3(k_z + q_z)a_z}{2} \times \\
 & \times \alpha_{k_x + q_x, k_y + q_y, k_z + q_z}^+ \alpha_{k_x k_y k_z} (b_{j; q_x q_y q_z} + b_{j; -q_x, -q_y, q_z}^+) \tag{3.37}
 \end{aligned}$$

i

$$\begin{aligned}
 H_{SV}^{(2)}(j) = & -8 \sqrt{\frac{\hbar}{MN_x N_y (N_z + 1)^3}} \frac{N_z + 1}{N_z + 2} \sum_{k_x k_y k_z} \sum_{q_x q_y q_z} \frac{\partial W_z}{\partial a_z} \frac{[\vec{l}_j(q_x q_y q_z)]_z}{\sqrt{\omega_j(q_x q_y q_z)}} \times \\
 & \times (-1)^{\nu+1} \sin a_z k_z \sin \frac{a_z k_z}{2} \cos \frac{3(k_z + q_z)a_z}{2} \left[\frac{\partial W_z^{(0)}}{\partial a_z} \sin \frac{3a_z q_z}{2} \cos \frac{a_z q_z}{2} + \right. \\
 & \left. + \frac{\partial W_z}{\partial z} 2 \sin \frac{5a_z q_z}{2} \cos a_z k_z \cos \frac{a_z q_z}{2} \right] \alpha_{k_x + q_x, k_y + q_y, k_z + q_z}^+ \alpha_{k_x k_y k_z} (b_{z; q_x q_y q_z} + b_{z; -q_x, -q_y, q_z}^+) . \tag{3.38}
 \end{aligned}$$

Da bi se dobio hamiltonijan interakcije za sloj $n_z = N_z - 1$ treba u formulama (3.37) i (3.38) zameniti faktor $(-1)^{\nu+1}$ sa faktorom $(-1)^{\nu+1+N_z}$ a $\frac{\partial W_\gamma^{(0)}}{\partial a_\gamma} \rightarrow \frac{\partial W_\gamma^{(N)}}{\partial a_\gamma}$; $\gamma = (x, y, z)$.

Analogno se za slojeve $n_z = 2, 3, \dots, N_z - 2$ dobija sledeća struktura hamiltonijana elektron-fonon interakcije

$$H_{VV}^{(F)}(j) = H_{VV}^{(1)}(j) + H_{VV}^{(2)}(j) , \quad n_z = 2, 3, \dots, N_z - 2 , \tag{3.39}$$

gde je

$$H_{VV}^{(1)}(j) = 16i \sqrt{\frac{\hbar}{MN_x N_y (N_z + 1)^3}} \frac{N_z + 1}{N_z + 2} \sum_{k_x k_y k_z} \sum_{q_x q_y q_z} \sum_{\gamma} \frac{\partial W_{\gamma}}{\partial a_{\gamma}} \frac{[\vec{l}_j(q_x q_y q_z)]_{\gamma}}{\sqrt{\omega_j(q_x q_y q_z)}} \times \\ \times (-1)^{\nu} \Sigma_0 \alpha_{k_x + q_x, k_y + q_y, k_z + q_z}^+ \alpha_{k_x k_y k_z} (b_{j; q_x q_y q_z} + b_{j; -q_x, -q_y, q_z}^+) \quad (3.40)$$

i

$$H_{VV}^{(2)}(j) = 8 \sqrt{\frac{\hbar}{MN_x N_y (N_z + 1)^3}} \frac{N_z + 1}{N_z + 2} \sum_{k_x k_y k_z} \sum_{q_x q_y q_z} \frac{\partial W_z}{\partial a_z} \frac{[\vec{l}_z(q_x q_y q_z)]_z}{\sqrt{\omega_j(q_x q_y q_z)}} \times \\ \times (-1)^{\nu} (\Sigma_1 \cos \frac{a_z q_z}{2} - \Sigma_2 \sin a_z q_z - \Sigma_3 \cos \frac{a_z q_z}{2}) \times \\ \times \alpha_{k_x + q_x, k_y + q_y, k_z + q_z}^+ \alpha_{k_x k_y k_z} (b_{j; q_x q_y q_z} + b_{j; -q_x, -q_y, q_z}^+). \quad (3.41)$$

Sume $\Sigma_i \equiv \Sigma_i(k_z, q_z, N_z)$, ($i = 0, 1, 2, 3$) u gornjim formulama nalaze se analogno pređašnjem slučaju. One su nakon eliminisanja N_z sledećeg oblika

$$\Sigma_0 = \frac{1}{8 \cos a_z (k_z + q_z)} \left[\sin(4k_z + \frac{9}{2}q_z)a_z + (-1)^{N_z+1} \sin[(4k_z + \frac{11}{2}q_z)a_z] \right] + \\ + \frac{1}{8 \cos a_z q_z} \left[\sin(\frac{9}{2}a_z q_z) + (-1)^{N_z+1} \sin \frac{11}{2}a_z q_z \right] - \\ - \frac{1}{8 \cos a_z k_z} \left[\sin(4a_z k_z - \frac{a_z q_z}{2}) + (-1)^{N_z+1} \sin[(4k_z + \frac{9}{2}q_z)a_z] \right] + \quad (3.42)$$

$$+ \frac{1}{8} [1 + (-1)^{N_z}] \sin \frac{a_z q_z}{2}, \\ \Sigma_1 = \frac{1}{8 \cos a_z (k_z + q_z)} \left[\sin 5(k_z + q_z)a_z + (-1)^{N_z+1} \sin(3k_z + 5q_z)a_z \right] + \\ + \frac{1}{8 \cos a_z q_z} \left[\sin(5q_z - k_z)a_z + (-1)^{N_z+1} \sin(k_z + 5q_z)a_z \right] + \\ + \frac{1}{8 \cos a_z k_z} \left[\sin(q_z - 5k_z)a_z + (-1)^{N_z} \sin[(3k_z + q_z)a_z] \right] + \quad (3.43)$$

$$+ \frac{1}{8} [1 + (-1)^{N_z}] \sin(k_z + q_z)a_z, \\ \Sigma_2 = \frac{1}{8 \cos a_z (k_z + q_z)} \left[\cos(4k_z + \frac{9}{2}q_z)a_z + (-1)^{N_z} \cos \frac{5}{2}a_z q_z \right] + \\ + \frac{1}{8 \cos a_z q_z} \left[\cos \frac{9}{2}a_z q_z + (-1)^{N_z} \cos \frac{11}{2}a_z q_z \right] + \\ + \frac{1}{8 \cos a_z k_z} \left[\cos(4k_z - \frac{q_z}{2})a_z + (-1)^{N_z} \cos(4k_z + \frac{q_z}{2})a_z \right] + \quad (3.44)$$

$$+ \frac{1}{8} [1 + (-1)^{N_z}] \cos \frac{a_z q_z}{2},$$

$$\begin{aligned}
\Sigma_3 = & \frac{1}{8 \cos a_z (k_z + q_z)} [\sin(3k_z + 4q_z)a_z + (-1)^{N_z+1} \sin(5k_z + 6q_z)a_z] + \\
& + \frac{1}{8 \cos a_z q_z} [\sin(k_z + 4q_z)a_z + (-1)^{N_z+1} \sin(6q_z - k_z)a_z] - \\
& - \frac{1}{8 \cos a_z k_z} [\sin 3k_z a_z + (-1)^{N_z+1} \sin 5a_z k_z] - \\
& - \frac{1}{8} [1 + (-1)^{N_z}] \sin a_z k_z ,
\end{aligned} \tag{3.45}$$

Gornji eksplisitni izrazi za odgovarajuće sume biće kasnije iskorišćeni kod procene konstante veze i efektivne konstante, te su stoga i navedeni u konačnoj formi.

3.3 Procena konstante interakcije i kritične temperature

Poznata je činjenica [23], [24] da je kritična superkonduktivna temperatura u tankim filmovima viša nego u odgovarajućoj masivnoj strukturi. Cilj ovog paragrafa je da se pomenuta eksperimentalna činjenica teorijski ispita i eventualno objasni. Prilikom analiza pretpostaviće se da je za fenomen superprovodljivosti odgovoran mehanizam Kuperovih parova. Poznato je [22], [62] da kritična temperatura u ovom slučaju bitno zavisi od konstante elektron-fonon interakcije i od elektronske gustine stanja na Fermi površini. Na osnovu rezultata rada [35] lako se može zaključiti da je granični impuls Fermi-sfere u filmu približno jednak graničnom impulsu Fermi-sfere u masivnom obrascu, pa se može uzeti da su gustine elektronskih stanja u masivnoj strukturi i filmu približno jednake. Osim toga, ako se vrlo tanak film tretira kao dvodimenzionala struktura onda je odnos gustina stanja filma i masivne strukture $\frac{\pi}{ak_F} = \sqrt[3]{\frac{\pi}{6}} = 0,81$. I po ovoj proceni gustine stanja su veoma bliske. Ove procene su navedene zbog toga da bi se ukazalo da gustina stanja nije onaj presudan faktor koji čini kritičnu temperaturu u filmu višom od kritične temperature masivne strukture, pa zbog toga razlog za višu kritičnu temperaturu u filmu treba tražiti u veličini elektron-fonon interakcije.

Procena konstante elektron-fonon interakcije vršena je tako što su sve fononske frekvencije zamenjene polovinom Debajeve frekvencije (ovo je de fakto srednja vrednost frekvencija od 0 do ω_D). Ostali delovi koeficijenta ispred operatorskog dela usrednjavani su u sloju $[k_F - k_G, k_F + k_G]$, jer u ovom sloju se prema BCS teoriji obrazuju Kuperovi parovi. Ovde je k_F -granični talasni vektor Fermi sfere, a k_G definiše oblast oko Fermi površine u kojoj se obrazuju parovi. Prema [72], veličina k_G može se izraziti preko Debajeve frekvencije ω_D po formuli

$$k_G = \frac{m_e}{\hbar k_F} \omega_D . \tag{3.46}$$

Pomenute procene trebalo bi da pruže objašnjenje zbog čega su kritične temperature u filmu više od odgovarajućih temperatura u masivnoj strukturi i koji su parametri u filmu presudni kod ovakvog povećanja.

Za $\omega_D = 5 \cdot 10^{13} Hz$, konstanta elektron-fonon interakcije za masivnu strukturu iznosi je $\mathcal{G}_B = 2.21 \cdot 10^{-20} J$, dok je za film maksimalna vrednost ove konstante bila $\mathcal{G}_F = 1.79 \cdot 10^{-20} J$ i to za troslojni film. Za dvoslojne filmove i filmove sa brojem slojeva većim od tri ova konstanta je bila znatno manja.

Na isti način je računata konstanta efektivne elektron-elektron interakcije koja se dobija virtuelnom razmenom fonona i nadjeno je da ona za masivnu strukturu iznosi $\mathcal{G}_{EB} = 3.23 \cdot 10^{-20} J$, dok je za troslojni film $\mathcal{G}_{EF} = 2.62 \cdot 10^{-20} J$.

Na osnovu ovoga i činjenice da je u BSC teoriji $T_C \sim \exp\left(-\frac{1}{g\mathcal{G}}\right)$, gde je g -gustina stanja koja je približno ista za film i za masivnu strukturu, može se zaključiti da je kritična temperatura T_C uvek niža u filmu nego u masivnoj strukturi. To drugim rečima znači da se mehanizmom interakcije zapreminskega elektrona sa zapreminskim fononima u okviru BCS teorije, ne može objasniti eksperimentalna činjenica da je T_C u filmovima više nego u odgovarajućoj masivnoj strukturi.

Analogne procene su vršene za interakciju površinskih elektrona sa zapreminskeim fononima. Ispostavilo se da interakcija površinskih elektrona sa zapreminskeim fononima daje veću konstantu elektron-fonon interakcije i efektivne elektron-elektron interakcije nego u masivnoj strukturi. Pri tome je važno naglasiti da debљina filma ovde ne igra presudnu ulogu zbog prigušujućeg faktora $e^{-n_z\eta}$. Film treba da bude dovoljno tanak da bi kod njega došli do izražaja uticaji granica jer one uslovjavaju nastanak površinskih stanja u njemu. Pomenuta veća konstanta interakcije dobija se samo onda ako su uslovi na granicama filma simetrični. Jasno je da ovaj zaključak ne važi za film na supstratu.

Hamiltonijan interakcija površinskih elektrona sa zapreminskeim fononima dobija se tako što se u (3.14) umesto (3.25) zameni izraz

$$\alpha_{n_x n_y n_z} = \sqrt{\frac{1 - e^{-2\eta}}{N_x N_y}} \sum_{k_x k_y} e^{i(n_x a_x k_x + n_y a_y k_y)} e^{-n_z \eta} \alpha_{k_x k_y \eta} \quad (3.47)$$

i ima oblik

$$\begin{aligned} H_{int}^{(F)}(j) = & 16i\sqrt{\frac{\hbar}{MN_x N_y (N_z + 2)}} \sum_{k_x k_y} \sum_{q_x q_y q_z} \sum_{\gamma} \frac{\partial W_{\gamma}}{\partial a_{\gamma}} \frac{[\vec{l}_j(q_x q_y q_z)]_{\gamma}}{\sqrt{\omega_j(q_x q_y q_z)}} \times \\ & \times \sin \frac{k_{\gamma} a_{\gamma}}{2} \sin \frac{q_{\gamma} a_{\gamma}}{2} \sin \frac{(k_{\gamma} + q_{\gamma}) a_{\gamma}}{2} \cdot 2(1 - e^{-2\eta})^{1/2} (1 - e^{-2\eta - 2q_z})^{1/2} \sin a_z q_z \times \quad (3.48) \\ & \times \alpha_{k_x + q_x, k_y + q_y, \eta + q_z}^+ \alpha_{k_x k_y \eta} (b_{j; q_x q_y q_z} + b_{j; -q_x, -q_y, -q_z}^+) . \end{aligned}$$

Ovde je naveden samo dominantni član koji se dobija iz (3.31) kada se u njemu zameni (3.47). Treba reći da se u gornjem izrazu pojavljuje faktor 2 zbog postojanja dveju graničnih površina i pretpostavke o simetričnim uslovima na odgovarajućim granicama. Parametar η je prema [35] reda 0,92.

Interakcije zapreminskega elektrona sa površinskim fononima i površinskih elektrona sa površinskim fononima ovde neće biti posebno analizirane jer bi to odnело mnogo prostora, a zaključci bi bili slični onima koji se izvode na osnovu interakcije površinskih elektrona sa zapreminskeim fononima. Treba još napomenuti da se usrednjavanje u intervalu $[k_F - k_G, k_F + k_G]$ ovde vršilo u kružnom prstenu i da je k_G za ovaj slučaj, na osnovu formule (3.46) veće za presten nego za sferu.

Proračunata je konstanta efektivne elektron-elektron interakcije za izvestan broj provodnika i to za masivnu strukturu i za film. Kritična temperatura je računata prema formuli

$$T_C = 1.14 \Theta_D e^{-\frac{1}{g\bar{g}_{ES}}} \quad (3.49)$$

gde indeks s jednom označava masivnu strukturu ($s=B$) a drugi put film ($s=F$). Rezultati su dati u Tabeli 1 [69].

El.	M [u]	$T_D[K]$	$\bar{g}_{EB} \cdot 10^{-20}[J]$	$\bar{g}_{EF} \cdot 10^{-20}[J]$	$T_{CB}^e[K]$	$T_{CB}^t[K]$	$T_{CF}^e[K]$	$T_{CF}^t[K]$
Al	26.98	420	2.77	4.18	1.17	1.85	1.18-5.7	4.83
Ga	69.72	325	2.61	4.75	1.08	1.28	6.4-8.56	7.38
In	114.82	109	4.00	5.51	3.40	2.77	3.43-4.5	4.21
La	138.91	142	5.08	5.89	4.88	5.21	5.0-6.74	6.37
Mo	95.94	460	2.15	3.79	0.92	0.34	3.3-3.8	3.64
Nb	92.91	277	4.15	5.69	9.25	8.36	6.2-10.1	11.18
Sn	118.69	195	4.30	5.32	3.72	4.08	3.84-6.0	6.12
Ti	47.9	429	2.31	3.23	0.39	0.69	1.3	1.17
Zn	65.37	319	2.31	3.42	0.87	0.49	0.47-1.48	1.36

Tabela 1. Navedeni parametri u kolonama tabele su sledeći, respektivno: ime elementa, njihove mase, njihove Debajeve temperature, konstanta efektivne elektron-elektron interakcije za balk, odgovarajuća za film, eksperimentalno T_C za balk, teorijsko T_C za balk, eksperimentalno T_C za film i teorijsko T_C za film. Odgovarajuće vrednosti za eksperimentalno T_C uzete su iz [23] i [24].

Sa priložene tabeli se jasno vidi da su teorijske vrednosti za odgovarajuće kritične temperature masivne strukture i tankog filma veoma bliske. To je bilo moguće postići s obzirom da se u računu pojavljuje konstanta površinske deformacije koja je proizvoljna. Prema tome, interakcija površinskih elektrona sa zapreminskim phononima objašnjava činjenicu da su superkonduktivne temperature filmova više od odgovarajućih temperaturi u masivnoj strukturi. Pošto filmovi, gotovo bez izuzetka, imaju višu kritičnu temperaturu od masivnih struktura može se zaključiti da je u filmovima dominantna interakcija površinskih elektrona sa zapreminskim phononima.

Na kraju ovog paragrafa treba napomenuti da se teorijski rezultati za masivnu strukturu koji su bliski eksperimentalnim podacima dobijaju samo u slučaju ako su sile ion-ion interakcije ekstremno kratkodometne, tj. ako opadaju sa rastojanjem po zakonu r^{-n} za $n \sim 10$ i veće. Ovo je na izvestan način potvrda ispravnosti Habardovog modela u kome se elektroni tretiraju kao lokalizovani ali sa mogućnošću haotičnog preskakanja sa čvora na čvor (hopping processes). Ovo predstavlja indirektnu potvrdu sve pobjedljivije pretpostavke da su procesi kretanja elektrona u superprovodnicima hopping tipa.

Glava IV

4 Transportne karakteristike tankih filmova

Izgradnja teorije transporta elektrona u metalima jedna je od principijelnih i najzanimljivijih zadataka u teoriji čvrstog stanja. Ona otkriva nove mogućnosti za primenu najrazličitijih metoda kako statističke tako i kvantne statističke fizike.

Osnovni zadatak kvantne transportne teorije u slaboravnotežnim procesima²⁵ makroskopskih sistema sastoji se u sledećem:

- ustanovljivanje linearnih (fenomenoloških) relacija između Fourier-komponenata odgovarajućih gustina struja²⁶ $I_\mu^{(p)}(\vec{k}; \omega)$ i sila koje dejstvuju na ravnotežni sistem (perturbacija) $F_\mu^{(p)}(\vec{k}; \omega)$. Za proizvoljan prostorno homogen sistem te relacije je moguće zapisati u opštem obliku

$$I_\mu^{(p)}(\vec{k}; \omega) = \sum_{p' \mu'} L_{\mu \mu'}^{(pp')}(\vec{k}; \omega) F_{\mu'}^{(p')}(\vec{k}; \omega) \quad (4.1)$$

gde su $p(\mu) = (1, 2, 3)$ i $p'(\mu') = (1, 2, 3)$ indeksi koji numerišu dekartove koordinate, dok funkcije $L_{\mu \mu'}^{(pp')}(\vec{k}; \omega)$ ne zavise od $F_{\mu'}^{(p')}$ i nazivaju se *kinetičkim koeficijentima*. Ovi koeficijenti su u opštem slučaju tenzori.

- ustanovljivanje opštih formula za $L_{\mu \mu'}^{(pp')}(\vec{k}; \omega)$ polazeći od mikroskopskog (kvantomehaničkog) opisivanja makroskopskog sistema,
- eksplicitno izračunavanje tih veličina u zavisnosti od temperature T , spoljašnjeg magnetnog polja \vec{B} i drugih intenzivnih parametara sistema.

Proizvodnja tankih filmova je u današnje vreme veoma usavršena tako da se mogu praviti čak i troslojni filmovi ($Pr - Y - Pr$) [32]. Osim toga i masivne $La - Ba - CuO$ strukture realizuju superprovodnost samo u pojedinim tankim slojevima. Zbog toga je i aktuelno i celishodno da se ispituju transportne karakteristike tankih filmova.

U ovoj glavi će biti ispitani koeficijent difuzije elektrona, zatim koeficijent termičke provodnosti i koeficijent električne provodnosti. Takođe će biti ispitana odnos termičke i električne provodnosti za film i odgovarajuću masivnu strukturu. Poznato je da je ovaj odnos u većem temperaturskom intervalu konstantan (Videman-Francov zakon). Ovaj rezultat dobijen je analizom masivnih struktura i svakako je od interesa da se proveri kakav je odnos termičke i električne provodnosti u filmovima.

²⁵ Procesi kod kojih otklon od ravnotežnog stanja nije veliki.

²⁶ Imaju se u vidu vektorske struje (naelektrisanja) $\vec{J}^{(p)}$ ($I_\mu^{(p)}$) kao i odgovarajuće vektorske sile $\vec{F}^{(p)}$ ($F_\mu^{(p)}$).

4.1 Kubo formule za kinetičke koeficijente

Kao što je poznato, [73], [74] kinetički koeficijenti za slaboravnotežne procese prosti se izražavaju preko vremenskih korelacionih funkcija ravnotežnog stanja. Veza između kinetičkih koeficijenata i vremenskih korelacionih funkcija zasnovana je pedesetih godina. Treba istaći da su osnovna svojstva funkcije reakcije ili odziva sistema bila najpre izučena od strane Kelena i Voltona [75], [76] početkom pedesetih godina. Nekoliko godina kasnije, Nakano [77] je razvio teoriju linearne reakcije za kvantne sisteme i dobio izraz za električnu provodnost izraženu preko vremenske korelace funkcije, izračunate po neperturbovanom ravnotežnom stanju. Ova i druga važna pitanja, povezana sa funkcijom reakcije, najbolje se osvetljavaju u radu Kuboa [78] objavljenog 1957. godine, a takođe i u preglednom članku [79].

Razmotrimo reakciju kvantnog ravnotežnog statističkog ansambla s hamiltonijanom H_0 , na uključenje u nekom momentu vremena t_0 zadane spoljašnje perturbacije koja zavisi eksplicitno od vremena.

Ukupni hamiltonijan jednak je

$$H = H_0 + H_t^1, \quad (4.2)$$

pri čemu se prepostavlja da pri $t = -\infty$, spoljašnja perturbacija odsustvuje, tj.

$$H_{t=-\infty}^1 = 0.$$

Da bismo obezbedili ravnotežno početno stanje, prepostavimo da se spoljašnje polje (perturbacija) uključuje adijabatski. Neka je ono oblika

$$H_t^1 = -AF(t), \quad F(-\infty) = 0 \quad (4.3)$$

gde je $F(t)$ - spoljašnja perturbujuća sila - c brojevi, a A - operatori koji ne zavise eksplicitno od vremena, pridruženi pojima $F(t)$.

Izračunajmo srednju vrednost neke dinamičke veličine B pri dejstvu perturbacije (4.3). U skladu sa definicijom,

$$\langle B \rangle_t = Sp\{\rho(t)B\}, \quad (4.4)$$

gde statistički operator (matrica gustine), zadovoljava kvantu Liuvilovu jednačinu kretnanja

$$ih\frac{\partial\rho(t)}{\partial t} = [H_0 + H_t^1, \rho(t)] \quad (4.5)$$

sa početnim uslovom

$$\rho(t)|_{t=-\infty} = \rho_0 = Q^{-1}e^{-H_0/\theta}, \quad Q = Sp\{e^{-H_0/\theta}\}, \quad \theta = k_B T, \quad (4.6)$$

Ovaj uslov označava da se pri $t = -\infty$, sistem nalazio u stanju statističke ravnoteže opisan Gibsovim kanonskim ansamblom.

Prepostavljajući da je perturbacija H_t^1 mala, rešenje jednačine (4.5) potražićemo u obliku

$$\rho(t) = \rho_0 + \rho_{1t}, \quad \rho_{1t}|_{t=-\infty} = 0. \quad (4.7)$$

Ako se zanemare članovi drugog reda veličine u poređenju sa H_t^1 i potom se pređe u reprezentaciju interakcije, dobija se

$$ih \frac{\partial}{\partial t} \rho_{1t}(t) = [H_t^1(t), \rho_0] , \quad (4.8)$$

gde je $H_t^1(t) = e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} H_t^1 e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t}$.

Ova jednačina sa uračunavanjem početnog uslova (4.7), ekvivalentna je integralnoj jednačini

$$\rho(t) = \rho_0 - \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t e^{-iH_0(t-t')/\hbar} [A, \rho_0] e^{iH_0(t-t')/\hbar} \cdot F(t') dt' . \quad (4.9)$$

Linearna reakcija sistema $\Delta\langle B \rangle_t \equiv \langle B \rangle_t - \langle B \rangle_0$, polazeći od jednačine (4.4) ima oblik

$$\begin{aligned} \Delta\langle B \rangle_t &= \frac{1}{i\hbar} Sp \int_{-\infty}^t e^{-iH_0(t-t')/\hbar} [\rho_0, A] e^{iH_0(t-t')/\hbar} \cdot BF(t') dt' = \\ &= \frac{1}{i\hbar} Sp \int_{-\infty}^t [\rho_0, A] B(t-t') \cdot F(t') dt' = \int_{-\infty}^t \phi_{BA}(t-t') \cdot F(t') dt' , \end{aligned} \quad (4.10)$$

gde je

$$B(t) = e^{iH_0 t / \hbar} B e^{-iH_0 t / \hbar} , \quad (4.11)$$

a $\phi_{BA}(t)$ predstavlja kvantnu funkciju reakcije i odredena je izrazom

$$\phi_{BA}(t) = \frac{1}{i\hbar} Sp \{ [\rho_0, A] B(t) \} . \quad (4.12)$$

Prepostavimo sada da je ρ_0 - Gibsova kanonska raspodela.

Ako iskoristimo poznatu Kuboovu jednakost [78] koja važi za bilo koji operator B ,

$$[e^{-\beta H}, B] = e^{-\beta H} \int_0^\beta e^{\lambda H} [B, H] e^{-\lambda H} d\lambda = i\hbar \int_0^\beta e^{-\beta H} \dot{B}(-i\hbar\lambda) d\lambda , \quad (4.13)$$

dobijamo

$$\phi_{BA}(t) = \frac{1}{i\hbar} Sp \{ [\rho_0, A] B(t) \} = \int_0^\beta Sp \rho_0 \dot{A}(-i\hbar\lambda) B(t) d\lambda , \quad (4.14)$$

gde je

$$\dot{B}(t) = \frac{1}{i\hbar} [B(t), H] \quad (4.15)$$

a ρ_0 je Gibsov kanonski ansambl.

Zamenom (4.14) i (4.10) u (4.4), dobijamo izraz za reakciju $\Delta\langle B \rangle_t$ kvantnog sistema u sledećem obliku

$$\Delta\langle B \rangle_t = - \int_0^\beta \int_0^\infty Sp \rho_0 \dot{A}(-i\hbar\lambda) B(t) F(t') d\lambda dt' =$$

$$= \int_0^\beta \int_0^\infty Sp \rho_0 \dot{B}(-i\hbar\lambda) A(-t) F(t') d\lambda dt'. \quad (4.16)$$

Ova formula predstavlja poznatu *Kubo formulu* za reakciju kvantnog sistema na spoljašnju perturbaciju. Kubo formula (4.16) izvodena je različitim metodama kako od strane Sovjetskih tako i ostalih naučnika. Međutim, najopštiji metod određivanja formula za transportne koeficijente razvijen je od strane Zubarjeva pomoću neravnotežnog statističkog operatora sistema i detaljno je izložen u knjizi [73].

4.2 Koeficijent difuzije elektrona

Kubo formula za tenzor difuzije [78], [80] ima oblik

$$D_{ij} = \frac{1}{\beta} \int_0^\infty dt e^{-\delta t} \int_0^\beta d\lambda \langle \hat{V}_i(-i\hbar\lambda) \hat{V}_j(t) \rangle, \quad (4.17)$$

gde je $\hat{V}(t)$ - operator brzine elektrona u Hajenbergovoj reprezentaciji, $\langle \dots \rangle = Sp e^{\frac{\Omega + \mu \hat{N} - \hat{H}}{\theta}} (\dots)$ - označava usrednjavanje po Gibsovom ansamblu, $\beta = \frac{1}{\theta}$, $\theta = k_B T$, $i, j \in (x, y, z)$.

Ako se operator brzine predstavi kao $\hat{V}_i(-i\hbar\lambda) = \hat{V}_i(0)e^{-i\hbar\lambda}$, onda sledi

$$\langle \hat{V}_i(-i\hbar\lambda) \hat{V}_j(t) \rangle = \langle \hat{V}_i(0) \hat{V}_j(t) \rangle e^{-i\hbar\lambda}. \quad (4.18)$$

Posle zamene (4.18) u (4.17) sledi

$$\begin{aligned} \frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\lambda \langle \hat{V}_i(-i\hbar\lambda) \hat{V}_j(t) \rangle &= \frac{1}{\beta} \langle \hat{V}_i(0) \hat{V}_j(t) \rangle \int_0^\beta d\lambda e^{-i\hbar\lambda} = \\ &= \langle \hat{V}_i(0) \hat{V}_j(t) \rangle \frac{1}{i\hbar\beta} (1 - e^{-i\hbar\lambda}). \end{aligned} \quad (4.19)$$

Pošto je $\frac{\hbar}{k_B T} \ll 1$, eksponent se može razviti u red, pa se konačno dobija

$$\frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\lambda \langle \hat{V}_i(-i\hbar\lambda) \hat{V}_j(t) \rangle \approx \langle \hat{V}_i(0) \hat{V}_j(t) \rangle. \quad (4.20)$$

Na osnovu ovoga, formula (4.17) postaje

$$D_{ij} = \lim_{\delta \rightarrow 0} \int_0^\infty dt e^{-\delta t} \langle \hat{V}_i(0) \hat{V}_j(t) \rangle. \quad (4.21)$$

Da bismo našli operator brzine sistema elektrona startovaćemo od izraza za centar mase elektrona

$$\hat{\vec{R}} = \sum_{\vec{n}} \vec{n} \alpha_{\vec{n}}^+ \alpha_{\vec{n}}, \quad (4.22)$$

gde je

$$\vec{n} = n_x \vec{i} + n_y \vec{j} + n_z \vec{k} \quad (4.23)$$

vektor rešetke, a $\alpha_{\vec{n}}^+$ i $\alpha_{\vec{n}}$ su operatori kreacije i anihilacije elektrona na čvoru \vec{n} .

Pošto je $\hat{V} = \frac{d\hat{\vec{R}}}{dt}$ sledi

$$\hat{V} = \frac{d\hat{\vec{R}}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{\vec{R}}, \hat{H}], \quad (4.24)$$

ili u komponentama

$$\begin{aligned} \hat{V}_x &= \frac{1}{i\hbar} [\hat{R}_x, \hat{H}] = \frac{1}{i\hbar} \left[\sum_{n_x n_y n_z} n_x \alpha_{n_x n_y n_z}^+ \alpha_{n_x n_y n_z}, H \right], \\ \hat{V}_y &= \frac{1}{i\hbar} [\hat{R}_y, \hat{H}] = \frac{1}{i\hbar} \left[\sum_{n_x n_y n_z} n_y \alpha_{n_x n_y n_z}^+ \alpha_{n_x n_y n_z}, H \right], \\ \hat{V}_z &= \frac{1}{i\hbar} [\hat{R}_z, \hat{H}] = \frac{1}{i\hbar} \left[\sum_{n_x n_y n_z} n_z \alpha_{n_x n_y n_z}^+ \alpha_{n_x n_y n_z}, H \right]. \end{aligned} \quad (4.25)$$

Hamiltonijan u formuli (4.24) dat je sa

$$H = H_e + H_p + H_{ep}, \quad (4.26)$$

gde je

$$H_e = \sum_{\vec{n} \vec{m}} W_{\vec{n} \vec{m}} \alpha_{\vec{n}}^+ \alpha_{\vec{n}} - \sum_{\vec{n} \vec{m}} W_{\vec{n} \vec{m}} \alpha_{\vec{n}}^+ \alpha_{\vec{m}}, \quad (4.27)$$

hamiltonijan elektronskog sistema,

$$H_p = \sum_{\vec{n}} \frac{p_{\vec{n}}^2}{2M} + \frac{C}{2} \sum_{\vec{n} \vec{l}} (\vec{u}_{\vec{n}} - \vec{u}_{\vec{n}-\vec{l}})^2, \quad (4.28)$$

hamiltonijan fononskog sistema, a

$$H_{ep} = \sum_{\vec{n} \vec{m}} (\vec{u}_{\vec{n}} - \vec{u}_{\vec{m}}) \nabla_{\vec{n}-\vec{m}} W_{\vec{n}-\vec{m}} \alpha_{\vec{n}}^+ \alpha_{\vec{n}} - \sum_{\vec{n} \vec{m}} (\vec{u}_{\vec{n}} - \vec{u}_{\vec{m}}) \nabla_{\vec{n}-\vec{m}} W_{\vec{n}-\vec{m}} \alpha_{\vec{n}}^+ \alpha_{\vec{m}}, \quad (4.29)$$

je hamiltonijan elektron-fonon interakcije.

Kada se nađu odgovarajući komutatori i izarzi za brzine zamene u (4.21), dobija se koeficijent difuzije

$$D_{ij} = D_{ij}^{(1)} + D_{ij}^{(2)} + D_{ij}^{(3)} + D_{ij}^{(4)}, \quad (4.30)$$

gde su odgovarajući članovi dati sledećim izrazima

$$D_{ij}^{(1)} = -\frac{1}{2\hbar^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \sum_{\vec{n} \vec{m} \vec{n}' \vec{m}'} (\vec{n} - \vec{m})_i (\vec{n}' - \vec{m}')_j W_{\vec{m} \vec{n}} W_{\vec{m}' \vec{n}'} \langle \alpha_{\vec{m}}^+(0) \alpha_{\vec{n}}(0) \alpha_{\vec{m}'}^+(t) \alpha_{\vec{n}'}(t) \rangle, \quad (4.31)$$

$$D_{ij}^{(2)} = -\frac{1}{2h^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \sum_{\vec{n}\vec{m}\vec{n}'\vec{m}'} (\vec{n} - \vec{m})_i (\vec{n}' - \vec{m}')_j W_{\vec{m}\vec{n}} \nabla_{\vec{m}' - \vec{n}'} W_{\vec{m}'\vec{n}'} \times \\ \times \langle \alpha_{\vec{m}}^+(0) \alpha_{\vec{n}}(0) \alpha_{\vec{m}'}^+(t) \alpha_{\vec{n}'}(t) [u_{\vec{m}'}(t) - u_{\vec{n}'}(t)] \rangle , \quad (4.32)$$

$$D_{ij}^{(3)} = -\frac{1}{2h^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \sum_{\vec{n}\vec{m}\vec{n}'\vec{m}'} (\vec{n} - \vec{m})_i (\vec{n}' - \vec{m}')_j W_{\vec{m}'\vec{n}'} \nabla_{\vec{m} - \vec{n}} W_{\vec{m}\vec{n}} \times \\ \times \langle \alpha_{\vec{m}}^+(0) \alpha_{\vec{n}}(0) \alpha_{\vec{m}'}^+(t) \alpha_{\vec{n}'}(t) [u_{\vec{m}}(0) - u_{\vec{n}}(0)] \rangle , \quad (4.33)$$

$$D_{ij}^{(4)} = -\frac{1}{2h^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \sum_{\vec{n}\vec{m}\vec{n}'\vec{m}'} (\vec{n} - \vec{m}')_i (\vec{n}' - \vec{m}')_j \nabla_{\vec{m} - \vec{n}} W_{\vec{m}\vec{n}} \nabla_{\vec{m}' - \vec{n}'} W_{\vec{m}'\vec{n}'} \times \\ \times \langle \alpha_{\vec{m}}^+(0) \alpha_{\vec{n}}(0) \alpha_{\vec{m}'}^+(t) \alpha_{\vec{n}'}(t) [u_{\vec{m}}(0) - u_{\vec{n}}(0)] [u_{\vec{m}'}(t) - u_{\vec{n}'}(t)] \rangle . \quad (4.34)$$

Ako na srednje vrednosti primenimo Vikovu teoremu i iskoristimo aproksimaciju najbližih suseda, formula za koeficijent difuzije svodi se na

$$D_{ii} = -2 \sum_s a^2 \frac{\partial^2 W_s}{\partial a_s^2} \frac{1}{hMN} \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{q}} \sin^2(q_s \varphi_s) \sin^2\left(\frac{k_s \varphi_s}{2}\right) \frac{1}{\Omega_{\vec{k},s}} \times \\ \times \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{-\delta t} \left[\frac{e^{-i\Omega_{\vec{k}} t}}{e^{\frac{h\Omega_{\vec{k}}}{\theta}} - 1} - \frac{e^{i\Omega_{\vec{k}} t}}{e^{-\frac{h\Omega_{\vec{k}}}{\theta}} - 1} \right] \cdot \frac{e^{-i\omega_{\vec{k} + \vec{q}} t}}{e^{\frac{h\omega_{\vec{k} + \vec{q}}}{\theta}} + 1} \frac{e^{i\omega_{\vec{q}} t}}{e^{-\frac{h\omega_{\vec{q}}}{\theta}} + 1} .$$

Pošto se izvrši integracija po vremenu pojave se množitelji tipa

$$\frac{1}{\Omega - \omega_1 - \omega_2 + i\delta} = \mathcal{P} \frac{1}{\Omega - \omega_1 - \omega_2} - i\pi\delta(\Omega - \omega_1 - \omega_2) . \quad (4.36)$$

Pošto su korelacione funkcije, analitičke, doprinos od glavne vrednosti u (4.36) jednak je nuli tako da ostaje samo δ -funkcija. Dobijeni izraz je izvanredno komplikovan pa ćemo ga napisati u aproksimacionoj formi i to za slučaj sobnih temperatura i za elektrone koji se nalaze u superprovodnom sloju $[k_F - k_G, k_F + k_G]$, koji je prvi put uveden u radu Bardina, Kupera i Šrifera [62]. U tom sloju, koji je uzak, talasni vektori se slabo menjaju pa se mogu zameniti konstantnim vrednostima. Takode treba isteći, da zamena celokupnog k -prostora uskim slojem zahteva „cut off“ integrala po talasnem vektoru (tako je uradeno i u [62]). To znači da $1 \rightarrow \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}}$, zamenjujemo odnosom zapremine zone debljine $2k_G$ i zapremine Fermi sfere. Drugim rečima *cut off* se sastoji u zameni

$$1 \rightarrow 6 \frac{m\omega_D}{\hbar K_F^2} , \quad (4.37)$$

gde je m - masa elektrona, a ω_D - Debajeva frekvencija.

Na osnovu navedenih aproksimacija za koeficijent difuzije se dobija konačan izraz

$$D = \frac{72}{\pi h^2} \left(\frac{\partial W}{\partial a} \right)^2 \frac{m}{M k_F^2 v} \left(\frac{mv}{h} \right)^4 (qa)^2 \frac{\theta}{h\Omega} e^{-\frac{2\hbar v k_F}{\theta}}. \quad (4.38)$$

Dobijeni izraz važi za masivnu strukturu. Za tanak film menjaju se koeficijenti u formuli (4.35) tako da ona dobija oblik

$$\begin{aligned} D_{ii}^{(F)} = & -2 \sum_s a^2 \frac{\partial^2 W_s}{\partial a_s^2} \frac{1}{\hbar M N_x N_y (N_z + 2)} \sum_{\vec{k}_{||} k_z} \sum_{\vec{q}_{||} q_z} \sin^2 \left(\frac{k_{||}^s \varphi_s}{2} \right) \sin k_z a \sin 2k_z a \times \\ & \times \cos \frac{1}{2} (k_z - 2q_z) a \cos \frac{1}{2} (3k_z - q_z) a \frac{1}{\Omega_{\vec{k},s}} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{-\delta t} \left[\frac{e^{-i\Omega_{\vec{k}} t}}{e^{\frac{\hbar\omega_{\vec{k}}}{\theta}} - 1} - \frac{e^{i\Omega_{\vec{k}} t}}{e^{-\frac{\hbar\omega_{\vec{k}}}{\theta}} - 1} \right] \times \\ & \times \frac{e^{-i\omega_{\vec{k}+\vec{q}} t}}{e^{\frac{\hbar\omega_{\vec{k}+\vec{q}}}{\theta}} + 1} \frac{e^{i\omega_{\vec{q}} t}}{e^{-\frac{\hbar\omega_{\vec{q}}}{\theta}} + 1}. \end{aligned} \quad (4.39)$$

Ako se u ovom izrazu izvrše aproksimacije koje su napred navedene, dolazi se do izraza za koeficijent difuzije tankog filma

$$D^{(F)} = \frac{72}{\pi h^2} \left(\frac{\partial W}{\partial a} \right)^2 \frac{m}{M k_F^2 v} \left(\frac{mv}{h} \right)^4 \left(\frac{N}{N+1} \pi \right)^2 \frac{\theta}{h\Omega} e^{-\frac{2\hbar v k_F}{\theta}}. \quad (4.40)$$

Za $a = 10^{-8} \text{ cm}$, $\frac{\partial W}{\partial a} = 10^{-4} \text{ erg/cm}$, $M = 2 \cdot 10^{-22} \text{ g}$, $k_F = 1.9 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-1}$, $v = 5 \cdot 10^5 \text{ cm/s}$, $\theta = 10^{-14} \text{ erga}$, $\Omega = 3 \cdot 10^{13} \text{ erga}$, nalazi se da je koeficijent difuzije za masivnu strukturu $D = 125.44 \text{ cm}^2/\text{s}$, dok je za iste vrednosti parametara koeficijent difuzije filma zavisan od broja slojeva i što je film tanji on ima manju vrednost. Tako na primer, za film od tri sloja je

$$D^{(F)}(3) = 55.75 \text{ cm}^2/\text{s}, \quad (4.41)$$

za pet slojeva

$$D^{(F)}(5) = 80.28 \text{ cm}^2/\text{s}, \quad (4.42)$$

dok je za hiljadu slojeva

$$D^{(F)}(10^3) = 125.19 \text{ cm}^2/\text{s} \quad (4.43)$$

i veoma je blisko vrednosti koeficijenta difuzije za masivnu strukturu, koja je

$$D = 125.44 \text{ cm}^2/\text{s}. \quad (4.44)$$

Dobijeni rezultati za koeficijent difuzije u ovoj disertaciji, pokazuju, da je koeficijent difuzije elektrona u tankim kristalnim filmovima na Debajevskim i sobnim temperaturomama približno dva puta niži od koeficijenta difuzije elektrona u masivnom kristalu. Ovaj rezultat je u skladu sa eksperimentalnim merenjima [81], [82].

Numeričke kalkulacije pokazuju da sa povećanjem debljine filma, koeficijent difuzije elektrona u metalu raste i pri debljinama $\sim 10^3 \text{ A}$ (nekoliko stotina slojeva), dostiže vrednost koeficijenta difuzije za masivnu strukturu koja je na osnovu formule (4.44) jednaka $125.44 \text{ cm}^2/\text{s}$.

4.3 Koeficijent termičke provodnosti

Prenošenje toplotne energije u metalima se ostvaruje posredstvom atoma koji osciluju oko svojih ravnotežnih položaja (fonona) i slobodnih elektrona. Pošto je kod metala koncentracija slobodnih elektrona velika to praktično na svim temperaturama transport toplotne energije se obavlja elektronima.

Poznato je da se toplotna svojstva tankih metalnih filmova mogu suštinski razlikovati od svojstava masivnih struktura [83], [84], [85]. Te razlike su posledica specifične geometrije ovakvih struktura, u prvom redu zbog postojanja granica sistema duž odgovarajućeg pravca.

Poznato je da je koeficijent termičke provodnosti povezan sa koeficijentom difuzije prostom relacijom

$$\lambda = \frac{1}{3} n_e c_e D , \quad (4.45)$$

gde je c_e - specifična toplota po jednom elektronu ($n_e c_e$ - elektronska specifična toplota jedinice zapremine, tj. C_e). Na bazi ove relacije može se vrlo lako dobiti temperaturska zavisnost koeficijenta termičke provodnosti kako za zapreminsku strukturu, tako i za tanak metalni film. Pošto je koeficijent difuzije pronaden, za nalaženje koeficijenta termičke provodnosti potrebno je naći izraz za specifičnu toplotu elektrona koja se može naći u gotovo svim udžbenicima fizike čvrstog stanja. Na niskim temperaturama kod čistih metala, kao i na visokim, ona je proporcionalna temperaturi [86], pa je koeficijent termičke provodnosti

$$\lambda = \frac{1}{3} 2\gamma' T D . \quad (4.46)$$

Da bi se dobila temperaturska zavisnost koeficijenta provodenja toplote, treba naglasiti da u ovoj formuli koeficijent difuzije treba računati i na niskim temperaturama što nije urađeno. Ipak, za temperatursku zavisnost koeficijenta difuzije bitni su srednji brojevi fonona koji su na niskim temperaturama proporcionalni trećem stepenu temperature ($\sim T^3$).

Za sobne i visoke temperature C_e je praktično proporcionalno temperaturi

$$C_e = 2\gamma' T , \quad (4.47)$$

što znači da koeficijent termičke provodnosti ima isti oblik kao i na niskim temperaturama. Kao što se vidi, na visokim temperaturama koeficijent termičke provodnosti ima istu temperatursku zavisnost (koja dolazi od specifične toplotne elektrona) kao i na niskim temperaturama, s tom razlikom što konstantni multiplikativni faktor koji ulazi u elektronsku specifičnu toplotu na sobnim temperaturama je niži za oko sto puta.

Numeričkim putem lako se dobija brojna vrednost za λ . Za masivnu strukturu i isti set parametara kao i pri računanju difuzije, dobija se za koeficijent termičke provodnosti sledeća vrednost

$$\lambda = 41.20 \frac{W}{mK} . \quad (4.48)$$

U slučaju filma od tri sloja je

$$\lambda(3) = 17.39 \frac{W}{mK} , \quad (4.49)$$

za pet slojeva

$$\lambda(5) = 25.54 \frac{W}{mK} , \quad (4.50)$$

dok je za film od hiljadu slojeva

$$\lambda(10^3) = 41.10 \frac{W}{mK} \quad (4.51)$$

i vrlo je bliska vrednosti (4.48) za masivnu strukturu.

Teorijska vrednost za λ nalazi se u eksperimentalnom opsegu koji upravo odgovara metalima [87]. Takođe za film ona je manja [82] i raste sa povećanjem debljine otprilike kao i ostali kinetički koeficijenti. Za dovoljno debeo film, ona poprima vrednost koju ima masivni metalni uzorak.

4.4 Koeficijent električne provodnosti

Polazeći od izraza za Kubo formulu izvedenu u prethodnom paragrafu, lako se dolazi do izraza za električnu provodnost koja je sledećeg oblika

$$\sigma_{ii} = \frac{1}{V} \int_0^\beta d\lambda \int_0^\infty e^{-\delta t} dt \langle J_i(-i\hbar\lambda) J_i(t) \rangle . \quad (4.52)$$

Ovde je $J_i(t)$ - operator struje u sistemu u Hajzenbergovoj reprezentaciji, $\langle \dots \rangle$ - označava usrednjavanje po Gibsovom ravnotežnom ansamblu, V - zapremina sistema.

Treba napomenuti da su se izračunavanjem koeficijenta električne provodnosti bavilo niz autora [77], [88]-[90].

U slučaju visokih temperatura i kvantnih ansambala, koeficijent električne provodnosti povezan je sa koeficijentom difuzije poznatom Ajnštajnovom relacijom [79]

$$\sigma_{ii} = e^2 D_{ii} \left(\frac{\partial n}{\partial \zeta} \right)_T , \quad (4.53)$$

gde je $\partial n / \partial \zeta$ - prosečna fluktuacija broja nosilaca struje a ζ - je hemijski potencijal elektrona koji je praktično jednak Fermijevoj energiji. Pošto je D već pronađeno, za nalaženje koeficijenta električne provodnosti potrebno je samo uvrstiti nađeni izraz za koeficijent difuzije elektrona.

Na niskim temperaturama nije računata temperaturska zavisnost koeficijenta difuzije pa će električna provodnost biti procenjena samo za visoke temperature.

Na visokim temperaturama koeficijent difuzije za masivni kristal je dat formulom (4.35) tako da je odgovarajući koeficijent električne provodnosti na osnovu (4.53) dat sledećim izrazom

$$\sigma_B = \frac{72ne^2}{\pi\zeta h^2} \left(\frac{\partial W}{\partial a} \right)^2 \frac{m}{Mk_F^2 v} \left(\frac{mv}{h} \right)^4 (qa)^2 \frac{\theta}{\hbar\Omega} e^{-\frac{2\hbar v k_F}{\theta}}, \quad (4.54)$$

dok je za film

$$\sigma_F = \frac{72ne^2}{\pi\zeta h^2} \left(\frac{\partial W}{\partial a} \right)^2 \frac{m}{Mk_F^2 v} \left(\frac{mv}{h} \right)^4 \left(\frac{N}{N+1}\pi \right)^2 \frac{\theta}{\hbar\Omega} e^{-\frac{2\hbar v k_F}{\theta}}. \quad (4.55)$$

Iz ove formule se vidi da u izraz za električnu provodnost ulazi broj slojeva.

Na bazi gornjih formula izvršena je numerička analiza. Za koeficijent električne provodnosti masivne strukture dobijena je brojna vrednost

$$\sigma_B = 17.18 \cdot 10^6 \Omega^{-1} m^{-1}. \quad (4.56)$$

U slučaju tankog filma, dobijeno je za troslojni

$$\sigma(3) = 7.64 \cdot 10^6 \Omega^{-1} m^{-1}, \quad (4.57)$$

petoslojni

$$\sigma(5) = 10.99 \cdot 10^6 \Omega^{-1} m^{-1}, \quad (4.58)$$

dok je za film od hiljadu slojeva

$$\sigma(10^3) = 17.15 \cdot 10^6 \Omega^{-1} m^{-1} \quad (4.59)$$

i blisko je vrednosti (4.56) za masivnu strukturu.

Na osnovu dobijenih teorijskih vrednosti za koeficijent električne provodnosti σ u oblasti visokih temperatura vidi se dobro slaganje sa eksperimentalnim vrednostima [87]. U slučaju filma, vrednosti za σ su manje od odgovarajućih u balku i rastu sa povećanjem debljine otprilike kao i prethodna dva kinetička koeficijenta. Takođe, za film od hiljadu slojeva brojna vrednost za koeficijent električne provodnosti je bliska onoj u masivnoj strukturi.

Najobičniji mehanizam koji smanjuje pokretljivost nosilaca u tankim metalnim filmovima u poređenju sa zapreminskim obrascima je svakako dimenzioni efekat. On se pojavljuje zbog finitnog kretanja elektrona duž jednog pravca. Osim toga, i granice tankih struktura se ponašaju kao rasejavajući centri. Takođe, usled njihovog postojanja mogu nastati površinska stanja što sve na neki način utiče na to da odgovarajući kinetički koeficijenti u ovakvim strukturama imaju niže vrednosti od odgovarajućih u masivnim strukturama.

4.5 Videman-Francov zakon

Poslednjih decenija intenzivno se radi na povećanju koeficijenta korisnog dejstva pri pretvaranju elektromagnetne (svetlosne) energije u električnu. Ovo povećanje je naročito značajno kod veštačkih satelita i kosmičkih šatlova jer se kod njih električna pogonska energija dobija na račun sunčeve svetlosne energije. Ispostavilo se da je koeficijent korisnog dejstva proporcionalan odnosu električne i termičke provodnosti. Postoje razlozi za verovanje da je pomenuti odnos veći u tankom filmu nego u odgovarajućoj masivnoj strukturi, pa shodno tome kao transformatore svetlosne energije u električnu, treba koristiti što tanje filmove.

Poznato je da slobodni elektroni u metalima učestvuju u transportu toplotne energije, a takođe i u obrazovanju električne struje. Stoga se prirodno nameće potreba da se između koeficijenta termičke provodnosti λ i koeficijenta specifične električne provodnosti uspostavi odredena veza. Eksperimentalno je utvrđeno (videti [87]) da oni metali koji imaju veću specifičnu električnu provodnost, imaju i veći koeficijent termičke provodnosti i obrnuto. Ispostavilo se da je ovaj odnos u masivnoj strukturi približno isti za sve čiste metale na višim temperaturama. Do ovog zaključka su došli Videman i Franc (Widemann-Franz), pa se zato ovo i zove Videman-Francov zakon.

Ovde će biti izvršena istraživanja odnosa termičke i električne provodnosti $\frac{\lambda}{\sigma T}$ u filmu i rezultati će biti uporedeni sa istim odnosom za masivne strukture.

Na osnovu dobijenih izraza za toplotnu i električnu provodljivost, numerički je određen ovaj odnos i za masivne strukture on iznosi

$$\frac{\lambda}{\sigma T} = 2.40 \cdot 10^{-8} \frac{W\Omega}{K^2}. \quad (4.60)$$

U slučaju filma navedeni odnos zavisi od debljine i za film od tri sloja

$$\frac{\lambda(3)}{\sigma(3)T} = 2.28 \cdot 10^{-8} \frac{W\Omega}{K^2}, \quad (4.61)$$

pet slojeva

$$\frac{\lambda(5)}{\sigma(5)T} = 2.32 \cdot 10^{-8} \frac{W\Omega}{K^2}, \quad (4.62)$$

i u slučaju filma od hiljadu slojeva on iznosi

$$\frac{\lambda(10^3)}{\sigma(10^3)T} = 2.39 \cdot 10^{-8} \frac{W\Omega}{K^2}. \quad (4.63)$$

Kao što se vidi iz gornjih formula, navedeni odnos u slučaju masivne strukture nalazi se u intervalu koji je eksperimentalno određen za metale [87].

Na osnovu rezultata izvršenih istraživanja navedenog odnosa za masivnu strukturu i film, vidi se da je ovaj odnos u filmu manji i da raste sa povećanjem broja slojeva. Kako je recipročna vrednost pomenutog odnosa proporcionalna koeficijentu korisnog dejstva pri pretvaranju svetlosne energije u električnu, treba istaći da je razlog za ovo verovanje sasvim opravdan polazeći od rezultata gornje analize, odakle sledi da treba koristiti što tanje filmove kao transformatore svetlosne energije u električnu. Ovaj rezultat bi mogao da ima veliki praktični značaj.

Zaključak

Gledano u celini moglo bi se zaključiti na osnovu dobijenih rezultata, da se u dopiranim filmovima krije niz korisnih osobina koje odgovarajuće masivne strukture ne poseduju.

Kao prvo, za pobudenje mehaničkih oscilacija u filmu potrebna je neka aktivaciona energija utoliko veća ukoliko je film tanji. To znači da se fononi u tankim filmovima pojavljuju na temperaturama nešto višim od apsolutne nule. Ova činjenica značajna je i za superprovodljivost a takođe i za probleme akustičke izolacije.

Sledeća interesantna činjenica vezana je za uticaj dopinga na prostornu raspodelu elektrona u filmu. Konstatovano je da ravnomerno raspodeljeni doping pomera maksimum prostorne distribucije elektrona ka granicama filma. Ovo je značajno posebno za superprovodnike novog tipa koji imaju znatno više kritične temperature, ali su superprovodne struje „sakrivene” u dubini strukture.

Istraživanje konstante efektivne elektron-elektron interakcije koja se pojavljuje u BCS teoriji, dovelo je do veoma interesantnog rezultata: najveću konstantu efektivne elektron-elektron interakcije daje interakcija površinskih elektrona sa zapreminskim fonomima pa se može zaključiti da je ovaj tip interakcije odgovoran za povećanje superkonduktivne kritične temperature.

Konačno, istraživanja transportnih karakteristika pokazala su da je u filmovima termička provodnost niža nego u odgovarajućim masivnim strukturama. S druge strane, odnos električne i termičke provodnosti u filmu je veći nego u masivnim strukturama, što prema nekim očekivanjima treba da dovede do povećanja koeficijenta korisnog dejstva pri pretvaranju svetlosne energije u električnu. Drugim rečima, filmove treba koristiti kao transformatore svetlosne energije u električnu, a ne masivne strukture.

Ako se analiziraju opšti izrazi koji su dobijeni za dopirane filmove, može se zaključiti da filmovi pored osobina ispitanih u ovoj disertaciji, kriju u sebi još mnogo korisnih efekata tako da sa istraživanjima filmova i dopiranih filmova treba još intenzivnije nastaviti, kako u tehnološkom i eksperimentalnom tako i u teorijskom smislu.

A Dodatak

A.1 Rekurentne relacije

Rekurentne relacije (rekurentne formule ili diferencne jednačine) su formule pomoću kojih se n -ti član nekog niza x_n izražava pomoću nekoliko prethodnih članova x_k , $k < n$.

Metode za rešavanje rekurentnih relacija postoje samo za neke klase. Najprostiju takvu klasu diferencnih jednačina, na kojoj ćemo se i zadržati čine *linearne homogene diferencne jednačine sa konstantnim koeficijentima*.

Rekurentna relacija (reda k) je sledećeg oblika

$$x_n = a_1 x_{n-1} + a_2 x_{n-2} + \dots + a_k x_{n-k}, \text{ za } n \geq k, \quad (\text{A.1})$$

gde su a_1, a_2, \dots, a_k zadane konstante, a k je fiksni broj. Takođe uzimamo da je $a_k \neq 0$ jer bi u suprotnom dobili rekurentnu relaciju manjeg reda. „Linearna“ se odnosi na činjenicu da se u (A.1) javljaju samo prve potencije od x (kao funkcije $x : N \rightarrow R$, $x(n) = x_n$), „homogena“ znači da nema konstantnih članova, dok je skup $\{a_1, \dots, a_k\}$ fiksni skup konstanti koje ne zavise od n .

Čuveni Fibonačijevi brojevi određeni su takođe jednom takvom relacijom
 $F_n = F_{n-1} + F_{n-2}$, za $n \geq 2$ i početnim uslovima $F_0 = 0$, $F_1 = 1$.
 Svakoj homogenoj diferencnoj jednačini (HDJ) oblika (A.1) tj.

$$x_n - a_1 x_{n-1} - a_2 x_{n-2} - \dots - a_k x_{n-k} = 0, \text{ za } n \geq k \quad (\text{A.2})$$

možemo pridružiti njenu *karakterističnu jednačinu*

$$\lambda^k - a_1 \lambda^{k-1} - a_2 \lambda^{k-2} - \dots - a_k = 0. \quad (\text{A.3})$$

Naš zadatak se sastoji u sledećem: izraziti eksplisitno niz x_n ($n \geq 0$) koji je zadat preko HDJ oblika (A.2) pri čemu su prvih k članova dati fiksni brojevi c_0, c_1, \dots, c_{k-1} (*početni uslovi*).

Najpre tražimo *opšte rešenje HDJ* (A.2) (tj. skup svih onih nizova koji zadovoljavaju (A.2)) pa među njima tražimo ono rešenje koje će zadovoljavati date početne uslove $x_0 = c_0, x_1 = c_1, \dots, x_{k-1} = c_{k-1}$. Opšte rešenje HDJ (A.2) dobijamo primenom sledećih lema

Lema 1. *Ako je λ -koren karakteristične jednačine (A.3) date HDJ višestrukosti m ($m \geq 1$), tada su svih m nizova $x_n = \lambda^n, x_n = n\lambda^n, \dots, x_n = n^{m-1}\lambda^n$ rešenja te HDJ tj. zadovoljavaju (A.2).*

Dokaz: Proverimo najpre da niz λ^n zadovoljava (A.2). Zaista,

$$\begin{aligned} x_n - a_1 x_{n-1} - a_2 x_{n-2} - \dots - a_k x_{n-k} &= \\ &= \lambda^n - a_1 \lambda^{n-1} - a_2 \lambda^{n-2} - \dots - a_k \lambda^{n-k} = \\ &= \lambda^{n-k}(\lambda^k - a_1 \lambda^{k-1} - a_2 \lambda^{k-2} - \dots - a_k). \end{aligned}$$

Kako je λ koren karakteristične jednačine (A.3) to je izraz u zagradi jednak nuli, što se i trebalo dokazati.

Uzmimo sada slučaj kada je $m \geq 2$. Dokažimo da su nizovi $n^p \lambda^n$ za $1 \leq p \leq m-1$ takode rešenja posmatrane HDJ. Označimo najpre karakteristični polinom HDJ (A.2) sa $P(x)$ tj.

$$P(x) = x^k - a_1 x^{k-1} - a_2 x^{k-2} - \dots - a_k \quad (\text{A.4})$$

i definišimo još m pomoćnih polinoma rekurzivno na sledeći način

$$\left. \begin{array}{ll} P_0(x) & \stackrel{\text{def}}{=} x^{n-k} P(x) \\ P_1(x) & \stackrel{\text{def}}{=} x \cdot (P_0(x))' \\ P_2(x) & \stackrel{\text{def}}{=} x \cdot (P_1(x))' \\ \dots & \dots \\ P_{m-1}(x) & \stackrel{\text{def}}{=} x \cdot (P_{m-1}(x))' \end{array} \right\} \quad (\text{A.5})$$

Iz definicija se vidi

$$\left. \begin{array}{l} P_0(x) = x^n - a_1 x^{n-1} - a_2 x^{n-2} - \dots - a_{k-1} x^{n-k+1} - a_k x^{n-k} \\ P_1(x) = nx^n - a_1(n-1)x^{n-1} - a_2(n-2)x^{n-2} - \dots - a_{k-1}(n-k+1)x^{n-k+1} - a_k(n-k)x^{n-k} \\ P_2(x) = n^2 x^n - a_1(n-1)^2 x^{n-1} - a_2(n-2)^2 x^{n-2} - \dots - a_{k-1}(n-k+1)^2 x^{n-k+1} - a_k(n-k)^2 x^{n-k} \\ \dots \\ P_{m-1}(x) = n^{m-1} x^n - a_1(n-1)^{m-1} x^{n-1} - \dots - a_{k-1}(n-k+1)^{m-1} x^{n-k+1} - a_k(n-k)^{m-1} x^{n-k} \end{array} \right\} \quad (\text{A.6})$$

Dalje, kako je λ -koren karakteristične jednačine (A.3) višestrukosti m to je

$$P(\lambda) = P'(\lambda) = \dots = P^{(m-1)}(\lambda) = 0 \quad (\text{A.7})$$

i $P^{(m)}(\lambda) \neq 0$. Iz (A.7) i (A.5) sledi $P_0(\lambda) = P_1(\lambda) = P_2(\lambda) = \dots = P_{m-1}(\lambda) = 0$ (primetimo da je $\lambda \neq 0$, jer u suprotnom bi bilo $a_k = 0$).

Iz (A.6) i (A.7) dobijamo da nizovi $\lambda^n, n\lambda^n, n^2\lambda^n, \dots, n^{m-1}\lambda^n$ zaista predstavljaju rešenja (partikularna) HDJ (A.2). \square

Lema 2. (linearno pravilo)

Ako su nizovi x_n i y_n rešenja date HDJ tada za proizvoljne konstante A i B je niz $z_n = Ax_n + By_n$, takođe jedno rešenje.

Dokaz: Neka x_n i y_n zadovoljavaju (A.2). Proverimo da i z_n zadovoljava istu

$$\begin{aligned} z_n - a_1 z_{n-1} - a_2 z_{n-2} - \dots - a_k z_{n-k} &= \\ &= (Ax_n + By_n) - a_1(Ax_{n-1} + By_{n-1}) - \dots - a_k(Ax_{n-k} + By_{n-k}) = \\ &= A(x_n - a_1 x_{n-1} - a_2 x_{n-2} - \dots - a_k x_{n-k}) + B(y_n - a_1 y_{n-1} - a_2 y_{n-2} - \dots - a_k y_{n-k}) \\ &= A \cdot 0 + B \cdot 0 = 0 \end{aligned}$$

\square

Kombinujući Lemu 1. i Lemu 2. dobijamo opšte rešenje HDJ.

Teorema 1: Ako su $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_t$ sva različita rešenja karakteristične jednačine (A.3) čije su višestrukosti m_1, m_2, \dots, m_t ($m_1 + m_2 + \dots + m_t = k$) tada je opšte rešenje HDJ (A.2) oblika

$$x_n = \lambda_1^n (A_{10} + nA_{11} + n^2 A_{12} + \dots + n^{m_1-1} A_{1(m_1-1)}) +$$

$$\begin{aligned}
& + \lambda_2^n (A_{20} + nA_{21} + n^2 A_{22} + \dots + n^{m_2-1} A_{2(m_2-1)}) + \\
& \quad \dots \\
& + \lambda_t^n (A_{t0} + nA_{t1} + n^2 A_{t2} + \dots + n^{m_t-1} A_{t(m_t-1)}) \tag{A.8}
\end{aligned}$$

gde su A_{ij} ($i = 1, \dots, t$; $j = 0, \dots, n_i - 1$) proizvoljne konstante.

□

Sada se postavlja pitanje: da li se mogu odrediti konstante A_{ij} tako da niz x_n dat preko (A.8) zadovoljava i početne uslove tj. $x_o = c_o$, $x_1 = c_1$, \dots , $x_{k-1} = c_{k-1}$? Odgovor je potvrđan. Konstante A_{ij} dobijamo rešavanjem linearog, kvadratnog sistema jednačina

$$A X = c,$$

koji ima jedinstveno rešenje

$$X = [A_{10}, A_{11}, \dots, A_{1(m_1-1)}, \dots, A_{t0}, A_{t1}, \dots, A_{t(m_t-1)}]^T,$$

gde je $c = [c_0, c_1, \dots, c_k]^T$, a determinanta matrice A

$$\left| \begin{array}{ccccccccccccc}
1 & 0 & \dots & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & \dots & 1 & 0 & \dots & 0 \\
\lambda_1 & \lambda_1 & \dots & \lambda_1 & \lambda_2 & \lambda_2 & \dots & \lambda_2 & \dots & \lambda_t & \lambda_t & \dots & \lambda_t \\
\lambda_1^2 & 2\lambda_1^2 & \dots & 2^{m_1-1}\lambda_1^2 & \lambda_2^2 & 2\lambda_2^2 & \dots & 2^{m_2-1}\lambda_2^2 & \dots & \lambda_t^2 & 2\lambda_t^2 & \dots & 2^{m_t-1}\lambda_t^2 \\
\vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \dots & \vdots & \vdots & & \vdots \\
\lambda_1^{k-1} & \dots & (k-1)^{m_1-1}\lambda_1^{k-1} & \lambda_2^{k-1} & \dots & (k-1)^{m_2-1}\lambda_2^{k-1} & \dots & \lambda_t^{k-1} & \dots & (k-1)^{m_t-1}\lambda_t^{k-1}
\end{array} \right|$$

je generalisana Vandermondova determinanta, za koju se zna [92] da je različita od nule tj. jednaka

$$|A| = \prod_{i=1}^t (-\lambda_i)^{\binom{m_i}{2}} \prod_{1 \leq i < j \leq t} (\lambda_j - \lambda_i)^{m_i m_j}.$$

A.2 Čebiševljevi polinomi treće vrste

U literaturi [93] se sreću Čebiševljevi polinomi prve i druge vrste $L_n = L_n(x)$ zadati rekurzivno na sledeći način

$$L_{n+1} - 2xL_n + L_{n-1} = 0, \text{ za } n \geq 1,$$

sa početnim uslovima $L_0 = 1$, $L_1 = x$ i $L_0 = 1$, $L_1 = \sqrt{1-x^2}$ respektivno.

Prilikom analize struktura sa narušenom translacionom simetrijom javlja se niz polinoma po ρ $C_n(\rho)$ ²⁷ koji se zadaje na sledeći način

$$C_{n+1} - \rho C_n + C_{n-1} = 0, \text{ za } n \geq 1 \tag{A.9}$$

sa početnim uslovima

$$C_0 = 1 \text{ i } C_1 = \rho. \tag{A.10}$$

²⁷Osim na ovom mestu ovi polinomi se sreću i u molekularnoj kvantnoj mehanici, kvantnoj hemiji itd.

S obzirom na veliku sličnost rekurentnih relacija prethodnih nizova, dogovorno ćemo ovaj poslednji niz polinoma $C_n(\rho)$ zvati niz **Čebiševljevih polinoma treće vrste**. On se može definisati i kao karakteristični polinom tridiagonalne matrice n -tog reda zadate na sledeći način

$$A_n = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ & & & \ddots & & & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix},$$

tj.

$$C_n(\rho) = |\rho I - A_n|$$

(I - jedinična matrica n -tog reda).

Karakteristična jednačina diferencne jednačine (A.9) je

$$r^2 - \rho r + 1 = 0, \quad (\text{A.11})$$

dok su njeni korenji

$$r_{1,2} = \frac{\rho \pm \sqrt{\rho^2 - 4}}{2}. \quad (\text{A.12})$$

Priroda rešenja gornje jednačine zavisi od vrednosti promenljive ρ te stoga razlikujemo sledeća dva slučaja:

- a) *I slučaj*: Jednačina (A.11) ima dvostruko realno rešenje $r_1 = r_2 = \frac{\rho}{2}$ tj. $|\rho| = 2$
Opšte rešenje HDJ (A.9) je oblika $C_n = (A + nB)r_1^n$ gde se konstante A i B dobijaju rešavanjem sistema

$$C_o = (A + 0 \cdot B)r_1^0$$

$$C_1 = (A + 1 \cdot B)r_1^1.$$

Dakle, $A = B = 1$, tj.

$$C_n = (1 + n) \left(\frac{\rho}{2} \right)^n = \begin{cases} 1 + n, & \text{za } \rho = 2 \\ (-1)^n(1 + n), & \text{za } \rho = -2 \end{cases}.$$

- b) *II slučaj*: Jednačina (A.11) ima različita rešenja tj. $|\rho| \neq 2$.

Opšte rešenje HDJ (A.9) je oblika $C_n = Ar_1^n + Br_2^n$ gde se konstante A i B (primetimo da su to funkcije po ρ) dobijaju iz početnih uslova (A.10) rešavanjem sistema

$$C_o = Ar_1^0 + Br_2^0,$$

$$C_1 = Ar_1^1 + Br_2^1.$$

Prostim računom se dobija da je

$$A = \frac{\rho + \sqrt{\rho^2 - 4}}{2\sqrt{\rho^2 - 4}} \quad \text{a} \quad B = \frac{\sqrt{\rho^2 - 4} - \rho}{2\sqrt{\rho^2 - 4}},$$

tj.

$$C_n = \frac{1}{\sqrt{\rho^2 - 4}} \left[\left(\frac{\rho + \sqrt{\rho^2 - 4}}{2} \right)^{n+1} - \left(\frac{\rho - \sqrt{\rho^2 - 4}}{2} \right)^{n+1} \right]. \quad (\text{A.13})$$

U ovom slučaju ćemo razlikovati dva podslučaja:

Ia) Kada su r_1 i r_2 konjugovano kompleksni brojevi tj. kada $\rho \in (-2, 2)$ (ili kraće $|\rho| < 2$)

i

Iib) Kada su r_1 i r_2 , oba realna i različita tj. $\rho \in (-\infty, -2) \cup (2, +\infty)$ (ili kraće $|\rho| > 2$).

Razmotrimo posebno ove podslučajeve:

IIa) -Slučaj $|\rho| < 2$.

Koristeći trigonometrijski oblik kompleksnog broja kao i Moavrov obrazac dobijamo

$$r_{1,2} = 1 \cdot (\cos \theta \pm i \sin \theta), \quad \text{gde je} \quad \frac{\rho}{2} = \cos \theta,$$

tj. iz (A.13) dobijamo

$$C_n = \frac{1}{2i \sin \theta} [(\cos(n+1)\theta + i \sin(n+1)\theta) - (\cos(n+1)\theta - i \sin(n+1)\theta)]$$

što dalje konačno daje

$$C_n = \frac{\sin(n+1)\theta}{\sin \theta}, \quad (\theta = \arccos \frac{\rho}{2}).$$

□

IIb) -Slučaj $|\rho| > 2$.

Koristeći funkcije $\sinh x \stackrel{\text{def}}{=} [e^x - e^{-x}]/2$ i $\cosh x \stackrel{\text{def}}{=} [e^x + e^{-x}]/2$ kao i njihove osobine $\cosh^2 x - \sinh^2 x = 1$ i $(\cosh x \pm \sinh x)^n = \cosh(nx) \pm \sinh(nx)$ formula (A.13) se smenom $\rho = 2 \cosh x$, za slučaj $\rho \in (2, +\infty)$ svodi na

$$C_n = \frac{\sinh(n+1)x}{\sinh x}, \quad (x = \operatorname{arccosh}(\frac{\rho}{2})),$$

a smenom $\rho = -2 \cosh x$, za slučaj $\rho \in (-\infty, -2)$ svodi na

$$C_n = (-1)^n \frac{\sinh(n+1)x}{\sinh x}, \quad (x = \operatorname{arccosh}(-\frac{\rho}{2})).$$

Navedimo još jednu lepu osobinu ovih Čebiševljevih polinoma treće vrste koja se u radu koristi.

Teorema 2: Čebiševljevi polinomi treće vrste C_N zadovoljavaju sledeću vezu²⁸

$$\rho^n C_N = \sum_{i=0}^n \binom{n}{i} C_{N+n-2i}$$

Dokaz ide matematičkom indukcijom po n .

Za $n = 1$ tvrdenje sledi iz same definicije $C_N = C_N(\rho)$ tj. iz (A.9). Dalje, pod pretpostavkom da tvrdenje važi za neko $n = k$ (i proizvoljno $N \in \mathcal{N}$) dokažimo da važi i za $n = k + 1$.

Zaista, koristeći poznate osobine binomnih koeficijenata kao i induktivnu pretpostavku dobijamo

$$\rho^{k+1} C_N = \rho^k (\rho C_N) = \rho^k (C_{N+1} + C_{N-1})$$

$$\begin{aligned} &= \rho^k C_{N+1} + \rho^k C_{N-1} = \sum_{i=0}^k \binom{k}{i} C_{(N+1)+k-2i} + \sum_{i=0}^k \binom{k}{i} C_{(N+1)+k-2i} = \\ &= \binom{k}{0} C_{(N+1)+k} + \binom{k}{1} C_{(N+1)+k-2} + \binom{k}{2} C_{(N+1)+k-4} + \dots + \binom{k}{k} C_{(N+1)-k} + \\ &\quad + \binom{k}{0} C_{(N-1)+k} + \binom{k}{1} C_{(N-1)+k-2} + \dots + \binom{k}{k} C_{(N-1)-k} = \\ &= \binom{k+1}{0} C_{N+k+1} + \binom{k+1}{1} C_{N+k-1} + \binom{k+1}{2} C_{N+k-3} + \dots + \binom{k+1}{k} C_{N-k+1} + \\ &\quad + \binom{k+1}{k+1} C_{N-k-1} = \sum_{i=0}^{k+1} \binom{k+1}{i} C_{N+n-2i} \end{aligned}$$

što se i trebalo dokazati.

□

A.3 Generativne funkcije

Jedna od najmoćnijih alatki u diskretnoj matematici jeste *generativna funkcija* (generacija ili z -transformacija). Pored mnogih drugih problema pomoću generativne funkcije mogu se rešavati i neke klase diferencnih jednačina.

Osnovna ideja kod generativnih funkcija je sasvim prosta. Ako je a_0, a_1, \dots, a_n konačni niz brojeva, tada je generativna funkcija ovog niza polinom

$$G(z) = a_0 + a_1 z + a_2 z^2 + \dots + a_n z^n = \sum_{k=0}^n a_k z^k,$$

²⁸Primetimo da koeficijenti uz Čebiševljeve polinome treće vrste čine vrstu čuvenog Paskalovog trougla.

gde je z jedan neodreden, apstraktni simbol²⁹. Slično, za beskonačni niz brojeva a_0, a_1, a_2, \dots definišemo njegovu generativnu funkciju kao red

$$G(z) = a_0 + a_1 z + a_2 z^2 + \dots + a_n z^n + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} a_n z^n.$$

Iz definicije se lako vidi da kada znamo generatrisu $G(z)$ nekog niza a_n onda su svi članovi niza potpuno određeni formulom

$$a_n = \frac{G^{(n)}(0)}{n!}.$$

Funkcija generatrisa kao jedan objekat zapravo zamenjuje čitav niz brojeva. Kako je rad sa jednim objektom, logično, mnogo lakši od rada sa njih beskonačno mnogo, tu se ogleda velika korist generativnih funkcija. Dakle, generativne funkcije predstavljaju samo način da se povežu zajedno svi izrazi u datom nizu a svrha joj je da se posmatranjem ove funkcije izvuku korisni zaključci o nizu a_n , $n \in N$. Nju, logično, tretiramo kao običnu funkciju samo kada je promenljiva z u području konvergencije reda i to u radu prećutno prepostavljamo. Uvek nastojimo prikazati je eksplicitnim analitičkim izrazom tj. „zatvorenom formulom”. Naprimer, generativna funkcija za konačan niz binomnih koeficijenata $\binom{n}{0}, \binom{n}{1}, \dots, \binom{n}{n}$, na osnovu binomne teoreme je

$$G(z) = \sum_{i=0}^n \binom{n}{i} z^i = (1+z)^n,$$

a generatrisa za niz $a_n = \lambda^n$, $n \in N$ je na osnovu formule za geometrijski red

$$G(z) = \sum_{i=0}^{\infty} \lambda^i z^i = \frac{1}{1-\lambda z}.$$

Nije teško pokazati da svaki niz koji zadovoljava neku *HDJ*, ima generativnu funkciju koja se u zatvorenoj formi može prikazati kao racionalna funkcija po z tj. kao količnik dva polinoma.

Zaista, niz x_n koji je određen (jednoznačno) rekurentnom relacijom oblika (A.1) i početnim uslovima $x_0 = c_0$, $x_1 = c_1$, \dots , $x_{k-1} = c_{k-1}$ je racionalna funkcija

$$G(z) = \frac{Q(z)}{a_k z^k + a_{k-1} z^{k-1} + \dots + a_1 z - 1}$$

gde je

$$Q(z) = -x_0 + (a_1 x_0 - x_1)z + (a_2 x_0 + a_1 x_1 - x_2)z^2 + \dots + (a_{k-1} x_0 + a_{k-2} x_1 + \dots + a_1 x_{k-2} - x_{k-1})z^{k-1}$$

dobijen množenjem polinoma u imenocu razlomka sa redom $G(z)$ i primenom odgovarajuće rekurentne relacije niza x_n (koeficijenti uz sve članove z^t za $t \geq k$ su jednaki nuli zbog rekurentne veze (A.1)).

²⁹Naziv „ z -transformacija” i potiče zbog česte upotrebe simbola z

A.4 Generativna funkcija Čebiševljevih polinoma treće vrste

Odredimo sada generativnu funkciju niza Čebiševljevih polinoma treće vrste

$$G(z) = \sum_{i=0}^{\infty} C_i z^i.$$

Kako su ovi polinomi određeni preko rekurentne veze (A.9), to tehnikom „teleskopiranja“ [92] odnosno sumiranjem relacija (A.9) za $n = 1, 2, \dots$ prethodno pomnoženih sa z^{n+1}

$$C_2 = \rho C_1 - C_0 \rightarrow z^2 C_2 = z^2 \rho C_1 - z^2 C_0$$

$$C_3 = \rho C_2 - C_1 \rightarrow z^3 C_3 = z^3 \rho C_2 - z^3 C_1$$

$$C_4 = \rho C_3 - C_2 \rightarrow z^4 C_4 = z^4 \rho C_3 - z^4 C_2$$

.....

$$C_n = \rho C_{n-1} - C_{n-2} \rightarrow z^n C_n = z^n \rho C_{n-1} - z^n C_{n-2}$$

.....

dobijamo

$$G(z) - C_1 z - C_0 = \rho z (G(z) - C_0) - z^2 G(z).$$

Sređivanjem ovog izraza dobijamo

$$G(z) = \frac{(C_1 - \rho C_0)z + C_0}{1 - \rho z + z^2},$$

što u slučaju Čebiševljevih polinoma treće vrste daje

$$G(z) = \frac{1}{1 - \rho z + z^2}. \quad (\text{A.14})$$

Ovaj izraz predstavlja generativnu funkciju Čebiševljevih polinoma treće vrste.

Dakle,

$$C_n = \frac{1}{n!} \frac{d^n}{dz^n} \left(\frac{1}{1 - \rho z + z^2} \right)_{|z=0}.$$

Pomoću generativnih funkcija možemo rešavati HDJ oblika (A.1), sa nekim početnim uslovima. Ilustrujmo tu tehniku na primeru Čebiševljevih polinoma treće vrste.

U slučaju kad su rešenja karakteristične jednačine (A.11) r_1 i r_2 različita (II slučaj) tehnikom „dekompozicije“ [94] generativnu funkciju (A.14) možemo zapisati u obliku

$$G(z) = \frac{A}{z - r_1} + \frac{B}{z - r_2}, \quad (\text{A.15})$$

gde je

$$r_1 = \frac{\rho + \sqrt{\rho^2 - 4}}{2}, \quad r_2 = \frac{\rho - \sqrt{\rho^2 - 4}}{2}, \quad A = \frac{1}{\sqrt{\rho^2 - 4}}, \quad B = -\frac{1}{\sqrt{\rho^2 - 4}}.$$

Razvojem sada svakog člana u (A.15) u red dobijamo

$$G(z) = -\frac{A}{r_1} \sum_{i=0}^{\infty} \left(\frac{1}{r_1}\right)^i z^i - \frac{B}{r_2} \sum_{i=0}^{\infty} \left(\frac{1}{r_2}\right)^i z^i,$$

što dalje daje

$$C_n = -\frac{A}{r_1} \left(\frac{1}{r_1}\right)^n - \frac{B}{r_2} \left(\frac{1}{r_2}\right)^n. \quad (\text{A.16})$$

Kako je $1/r_1 = r_2$ to je gornji izraz (A.16) identičan sa (A.13).

U slučaju $1/r_1 = r_2 = \rho/2$ generativna funkcija niza Čebiševljevih polinoma treće vrste se može zapisati kao

$$G(z) = \frac{1}{(z - r_1)^2}.$$

Kako je $G(z) = Q'(z)$ gde je

$$Q(z) = -\frac{1}{(z - r_1)} = \frac{2}{\rho} \sum_{i=0}^{\infty} \left(\frac{2}{\rho}\right)^i z^i,$$

to je

$$C_n = \frac{2}{\rho} (n+1) \left(\frac{2}{\rho}\right)^{n+1} = \begin{cases} 1 + n, & \text{za } \rho = 2 \\ (-1)^n (1+n), & \text{za } \rho = -2 \end{cases}$$

što smo i ranije dobili u paragrafu 4.2.

Literatura

- [1] M. Born and K. Huang, *Dynamical Theory of Crystal Lattices*, London and New York 1954.
- [2] O. Madelung, *Introduction to Solid-State Theory*, New York, 1978.
- [3] V.M. Agranovič, V.L. Ginzburg, *Kristalooptika s učetom prostranstvennoi dispersii i teorija eksitonov*, Nauka, Moskva, 1979.
- [4] I.M. Lifšic, A.N. Rozeinveig, *ŽETF* **18**, (1948) 1012.
- [5] I.M. Lifšic, S.I. Pekar, *UFN* **56**, (1955) 531.
- [6] A.A. Maradudin, *Defekti i kolebatelnii spectr kristalov*, Mir, Moskva, 1968.
- [7] Lj.M. Ristovski, B.S. Tošić, G.S. Davidović, *Physica C* **160**, (1989) 548.
- [8] J.P. Šetrajčić, D.Lj. Mirjanić, V.D. Sajfert, B.S. Tošić and R.P. Đajić, *Physica A* **190**, (1992) 363.
- [9] B.S. Tošić, J.P. Šetrajčić, R.P. Đajić-Jovanović and D.Lj. Mirjanić, *Phys. Rev. B* **36**, (1987) 9094.
- [10] M. Pantić, J.P. Šetrajčić, B.S. Tošić and D.Lj. Mirjanić, *Balkan Phys. Lett.*, **2**, (1994) 734.
- [11] N.W. Ashcroft, N.D. Mermin, *Solid State Physics*, Holt, Rinehart & Winston, New York, 1976.
- [12] W.A. Harrison, *Solid State Theory*, New York, 1970.
- [13] J.M. Ziman, *Principles of the Theory of Solids*, Univ. Press, Cambridge, 1972.
- [14] B.S. Tošić, *Statistička fizika*, PMF IF, Novi Sad, 1978.
- [15] G. Leibfrid, N. Breuer, *Point Defects in metals*, New York, 1978.
- [16] J.P. Šetrajčić, R.P. Đajić, D.Lj. Mirjanić and B.S. Tošić, *Phys. Scr.* **42**, (1990) 732.
- [17] B.S. Tošić, J.P. Šetrajčić, D.Lj. Mirjanić, Z.V. Bundalo, *Physica A* **184**, (1992) 354.
- [18] R.P. Đajić, J.P. Šetrajčić, D.Lj. Mirjanić and B.S. Tošić, *Int. J. Mod. Phys. B* **1**, (1987) 1001.
- [19] B.S. Tošić, J.P. Šetrajčić, U.D. Timotić and D.Lj. Mirjanić, *Int. J. Mod. Phys. B* **1**, (1988) 919.
- [20] V.M. Burdeinii, *FMM*, **52**, (1981) 1141.
- [21] V.M. Agranovič, *Teorija eksitonov*, Nauka, Moskva, 1978.
- [22] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, Wiley & Sons, New York, 1971.

- [23] C.R.C Handbook of Chemistry and Physics, 59rd ed. table *E – 87*, 1978-1979.
- [24] C.R.C Handbook of Chemistry and Physics, 70rd ed. table *E – 97*, 1989-1990.
- [25] W. Haubenreisser, W. Brodkorb, A. Corciovel and G. Costache, *Phys.Stat.Sol. (b)* **53**, (1972) 9.
- [26] J.P. Šetrajčić, M. Pantić, *Phys.Lett. A* **192**, (1994) 292.
- [27] T. Fujiwara, K. Ohtaka, S. Yanagawa, *J.Phys.Soc. Japan*, **25**, (1968) 1236.
- [28] V.M. Burdeinii, *Ukr.fiz.žurnal*, **21**, (1976) 926.
- [29] V.M. Burdeinii, K.D. Tovstyuk, *Ukr.fiz.žurnal*, **20**, (1975) 1154.
- [30] D.Lj. Mirjanić, M. Pantić and J.P. Šetrajčić, *Proc.Kriogenics CP* **10**, (1994) 157.
- [31] P.W. Anderson, *Concepts in Solids: Lectures on the theory of solids*, W.A.Benjamin, INC. New York, 1963.
- [32] T. Ando, A.B. Fowler, F. Stern, *Rev. Mod. Phys.*, **54**, (1982).
- [33] I.E. Tamm, *ŽETF*, **3**, (1933) 34.
- [34] J.C. Hubbard, *Proc. Roy. Soc. A* **276**, (1963) 238.
- [35] M. Pantić, Lj.M. Ristovski, Lj.P. Mašković and B.S. Tošić, *Physica A*, **227**, (1996) 43.
- [36] M.G. Cottam, D.R. Tiley, *Introduction to Surface and Superlattice Excitations*, Cambridge University Press 1989.
- [37] V.M. Agranovich, R. Loudon, *Modern Problems in Condensed Matter Sciences: Surface Excitons*, Nauka, Moscow, 1985.
- [38] L.T. Kreschitchishina and E.L. Nagayev, *Solid State Physics* **30**, (1988) 1763.
- [39] S.G. Davison, J.D. Levine, *Surface States*, Academic Press, New York and London, 1970.
- [40] V.V. Briksin, Yu.A. Firsov, *FTT* **13**, (1971) 469.
- [41] V.N. Lutskii, *Priroda* **10**, (1978) 70.
- [42] V.N. Lutskii, T.N. Pinsker, *Razmerno kvantovanye*, Znanye, Moskva, 1983.
- [43] A.S. Davydov, *ŽETF*, **45**, (1963) 723.
- [44] A.S. Kondratiev, S.S. Nedorezov, V.G. Peshanskii, *FMM*, **3**, (1990) 5.
- [45] V.A. Volkov, T.N. Pinsker, *ŽETF*, **70**, (1976) 2268; **72** (1977) 1087.
- [46] M.I. Dyakonov, A.V. Haeckii, *ŽETF*, **82**, (1982) 1584.

- [47] A.Ya. Šik i Yu.V. Šharcev, *Kvantovii Effekt Hola*, Sb.stateii, Mir, Moskva, 1986.
- [48] Lj. Mašković, M. Pantić, *Zbornik radova PMF*, (1995) - u štampi
- [49] A.S. Davydov, *Teorya tverdogo tela*, Nauka, Moskva, 1976.
- [50] B.S. Tošić, Lj.D. Mašković and R.M. Maksimović, *Physica A* **211**, (1994) 475.
- [51] J.G. Bednorz and K.A. Müler, *Z. Phys. B* **64**, (1986) 188.
- [52] C.W. Chu, P.H. Hou, R.L. Meng, L. Gao, Z.J. Huang and Y.Q. Wang, *Phys.Lett. A* **58**, (1987) 405.
- [53] Z.Z. Shong and A.M. Hesman, *Nature* **55**, (1988) 332.
- [54] J. Kim, J.R. Dutcher, S. Lee, G.I. Stegeman and C.M. Falco, MRS Annual Meeting, Boston (1990).
- [55] P.F. Garcia, A.D. Meinhaldt and A. Suma, *Appl. Phys. Lett.* **47**, (1985) 178.
- [56] R.E. Somekh et al., *Nature*, **326**, (1987) 857.
- [57] R.M. Silver, J. Talvacchio and A.L. de Lozanne, *Appl. Phys. Lett.* **51**, (1987) 2149.
- [58] T. Aida, T. Fukazawa, K. Takagi and K. Miyauchi, *Jpn. J. Appl.Phys.* **51**, (1988) 1098.
- [59] P. Fulde and P. Horsch, *Europhys. News* **24**, (1993) 73.
- [60] C.M. Falco, *J. Phys. Colloq.* **45**, (1984) C5-499.
- [61] D.Lj. Mirjanić, B.S. Tošić and J.P. Šetrajčić, *Proc. Kryogenics BP* **18**, (1988) 4.
- [62] J. Bardeen, L. Cooper and J. Schrieffer, *Phys. Rev.* **108**, (1957) 1175.
- [63] S. Lazarev, M. Pantić and B.S. Tošić, *Physica A*, 1997. - prihvaćeno
- [64] S.R. Streight and D.L. Mills, *Phys. Rev. B*, (1988-I) 965.
- [65] R. Matz and H. Luth, *Phys. Rev. Lett.* **46**, (1981) 500.
- [66] D. Jerome, H.J. Schultz, *Adv.Phys.*, **31**, (1982), 299.
- [67] Yu.A. Firsov i dr., *Polaroni*, Nauka, Maskva, 1975.
- [68] A.S. Davydov, *Solitoni v molekularnih sistemah*, Naukova dumka, Kiev (1984).
- [69] M. Pantić, Lj. Mašković and B.S. Tošić, *Internat. J. Modern Phys. B*, 1997. - polato
- [70] L.N. Bulaevskii, *UFN*, **115**, (1975), 263.
- [71] D.V. Kapor, S.D. Stojanović, M.J. Škrinjar and B.S. Tošić, *phys. stat. sol. (b)* **74**, (1976) 103.

- [72] A.S. Davydov, *Kvantovaya mehanika*, Nauka, Moskva, 1973.
- [73] D.N. Zubaryev, *Neravnovesnaya statističeskaja termodinamika*, Nauka, Moskva, 1971.
- [74] G. Mahan, *Many-Particle Physics*, Plenum Press, New York and London, 1983.
- [75] H.B. Callen, T.A. Welton, *Phys. Rev.*, **83**, (1951) 34.
- [76] H.B. Callen, R.F. Greene, *Phys. Rev.*, **86**, (1952) 702; **88**, (1952) 1387.
- [77] H. Nakano, *Prog. Theor. Phys.*, **15**, (1956) 77.
- [78] R.J. Kubo, *Phys. Soc. Japan*, **12**, (1957) 570.
- [79] R.J. Kubo, *Lectures in Theoretical Physics*, **1**, Ed.W.Britten, New York (1959) 120.
- [80] A. Ron, N. Tzoar, *Phys. Rev.*, **133**, (1964) 1378.
- [81] A.T. Pugačev, Yu.A. Volkov, *FTT*, **14**, (1974) 1477.
- [82] Yu.A. Volkov, L.S. Palatnik, A.T. Pugačev, *ZhETF*, **70**, (1976) 2244.
- [83] A.F. Mayadas, M. Shatzkes, *Phys. Rev.* **1B**, (1970) 1382.
- [84] L.S. Čopra, *Električeskie yavleniya v tonkih plenkah*, Mir, Moskva, 1972.
- [85] L.S. Palatnik, M. Ya. Fuks, V.M. Kosević, *Mehanizam obrazovaniya i substruktura kondensirovanih plenkan*, Nauka, Moskva, 1972.
- [86] R.P. Feynman, *Statistical Mechanics*, W.A. Benjamin, Inc. Advanced Book Program Reading, Massachusetts, 1972.
- [87] Ž.A. Spasojević, Z.V. Popović, *Elektrotchnički i elektronski materijali*, Beograd, 1995.
- [88] N.M. Plakida, *Nekatorie voprosi kvantovoi teorii tverdogo tela*, Izdateljstvo Moskovskogo universiteta, 1974.
- [89] N.M. Plakida, *ZhETF*, **53**, 6(12) (1967) 2041.
- [90] K.H. Michel and M.J. van Leeuwen, *Physica*, **30** (1964) 410.
- [91] S.Goldberg, *Difference Equations*, New York, John Wiley & Sons, Inc. London, New York, 1961.
- [92] D.Veljan, *Kombinatorika i teorija grafova*, Školska knjiga, Zagreb, 1989.
- [93] D.Mitinović, *Uvod u specijalne funkcije*, Naučna knjiga, Beograd, 1989.
- [94] R.J.McEliece, R.B.Ash, C.Ash, *Introduction to Discrete Mathematics*, McGraw-Hill Book Company, 1989.

UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET

Ključna dokumentacijska informacija

Redni broj:

RBR

Identifikacioni broj:

IBR

Tip dokumentacije: Monografska dokumentacija

TD

Tip zapisa: Tekstualni štampani materijal

TZ

Vrsta rada: Doktorska disertacija

VR

Autor: Milan Pantić

AU

Mentor: Prof. dr Bratislav Tošić

MN

Naslov rada: Provodne i superprovodne osobine dopiranih metalnih filmova

NR

Jezik publikacije: Srpski, latinica

JP

Jezik izvoda: Srpski, engleski

JI

Zemlja publikovanja: Savezna Republika Jugoslavija

ZP

Uže geografsko područje: Srbija, Novi Sad

UGP

Godina: 1997.

GO

Izdavač: Autorski reprint

IZ

Mesto i adresa: Institut za fiziku, Prirodno-matematički fakultet, Novi Sad,
Trg Dositeja Obradovića 4

MA

Fizički opis rada: Rad se sastoji iz 4 glave, 100 strana, 94 citata u bibliografiji, 1 tabela,
7 slika, 1 prilog

FO

Naučna oblast: Fizika

NO

Naučna disciplina: Fizika kondenzovane materije

ND

Predmetna odrednica/Ključne reči:

PO

Tanak film, provodljivost, superprovodljivost, fononi, elektroni, elektron-fonon interakcija, transportni koeficijenti

UDK:

Čuva se: u biblioteci Instituta za fiziku i matematiku

ČU

Važna napomena:

VN

Izvod:

IZ

Istraživanja u ovoj disertaciji se bave analizom dinamičkih i termodinamičkih karakteristika tankih filmova kao i uticaja dopinga i graničnih uslova na ove osobine. Formulisani su hamiltonijani i ispitani elektronski i fononski sistem kao i njihova interakcija. Pokazano je da filmovi kriju niz korisnih osobina koje odgovarajuće masivne strukture ne poseduju. Konstatovano je da je za pobude fona u filmu potrebna neka aktivaciona energija. Pokazano je da ravnomerno raspoređen doping, pomera maksimum prostorne distribucije elektrona ka granicama filma. Takođe je konstatovano da najveću konstantu efektivne elektron-elektron interakcije, daje interakcija površinskih elektronskih stanja sa zapreminskim fononskim stanjima. Istraživanja transportnih karakteristika su pokazala da je u filmovima odnos električne i termičke provodnosti veći nego u balku, što može imati praktičan značaj.

Datum prihvatanja teme od strane NN veća: 29. jun 1995. godine

DP

Datum odbrane:

DO

Članovi komisije:

KO

Predsednik:

Član: Prof. dr Bratislav Tošić, red. prof. PMF, Novi Sad, mentor

Član:

UNIVERSITY OF NOVI SAD
FACULTY OF SCIENCES

Key words documentation

Accession number:

ANO

Identification number:

INO

Document type: Monographic type

DT

Type of record: Text printed material

TR

Contents code: Doctoral thesis

CC

Author: Milan Pantić

AU

Mentor: Prof. dr Bratislav Tošić

MN

Title: Conductivity and superconductivity properties of doping metals films

TI

Language of text: Serbian, Latin

LT

Language of abstract: Serbian, English

LA

Country of publication: Federal Republic of Yugoslavia

CP

Locality of publication: Serbia, Novi Sad

LP

Publication Year: 1997

PY

Publisher: Author's reprint

PU

Publ. place: Institute of Physics, Faculty of Sciences, Novi Sad,

Trg Dositeja Obradovića 4

PP

Physical description: Thesis is made by 4 chapters, 100 pages, 94 citations in literature,
1 tables, 7 pictures, 1 additional lists

PD

Scientific field: Physics

SF

Scientific discipline: Physics of condensed matter

SD

Subject / Key words:

SKW

Thin film, conductivity, superconductivity, electrons, phonons, electron-phonon interaction, transport coefficient

UC:

Holding data: the library in Institute of Physics and Mathematics, Novi Sad, Yugoslavia

HD

Note:

N

Abstract:

AB

Investigations in this Thesis deal with analysis of both: dynamical and thermodynamical characteristics of thin films as well as the influence of perturbation (doping) and boundary conditions onto these properties. Hamiltonians of the electron and phonon systems and Hamiltonian of electron-phonon interaction have been formulated and investigated. It has been shown that the films possess some useful properties which are not the properties of the corresponding bulk structures. It has been concluded that the excitation of phonons demands an activation energy. It has been shown that the homogeneously distributed perturbation of the film shifts the maximum of the spatial distribution of electrons towards the boundaries. The highest coupling constant of the effective electron-electron interaction was found to result from the interaction of surface electrons with bulk phonons. The study of the transport characteristics has shown that the ratio of electrical and thermal conductivity is greater in films than in the bulk, a fact of importance for practice.

Accepted by the Scientific Board on: June 29, 1995

ASb

Defended:

DE

Thesis defended board:

DB

President:

Member: Prof. dr Bratislav Tošić, Full Professor, Faculty of Sciences, Novi Sad, mentor

Member:

Najnoviji trendovi u istraživanju tankih filmova

U disertaciji je težište istraživanja stavljen na uticaj graničnih uslova na prostornu distribuciju slobodnih nosilaca nanelektrisanja (elektrona), njihove transportne karakteristike i na uzroke koji mogu da povećaju njihovu superkonduktivnu kritičnu temperaturu.

Problematika tankih filmova je veoma popularna i čine se mnogobrojni pokušaji da se na osnovu fizičkih karakteristika tankih filmova dobiju rezultati koji imaju praktičnu vrednost. Pored istraživanja koja su predmet ove disertacije, uveliko se radi na pokušajima stimulisanih efekata (povećanje superprovodne kritične temperature T_c - pogodnija raspodela elektrona) i na magnetno-mehaničkim uticajima na ponašanje slobodnih nosilaca u filmu. Ipak, najveći broj novijih radova posvećen je konkretnim kristalnim strukturama i teorijskom kao i eksperimentalnom istraživanju efekata koji bi ove strukture uveli u praktičnu primenu.

Radova ima veoma mnogo, pa nema prostora da svi budu navedeni. Biće navedeni samo neki tipični radovi za trendove koji su napred spomenuti.

Problemi stimulacije:

- D1. L.L. Chang and L. Esaki, *Phys. Today*, Oct. (1992) 36.
- D2. H. Reuter, H. Schmitt and M. Böffgen, *Thin Solid Films* **254** (1995) 96
- D3. S.F. Yoon, Y.B. Miao and K. Radhakrishnan, *Thin Solid Films* **279** (1996) 11

Istraživanja magnetno-mehaničkih efekata:

- D4. J.S. Zhu, X.M. Lu, P. Li, W. Jiang and Y.M. Wang, *Solid State Commun.* **101** (1997) 263
- D5. S.T. Chui, V.N. Ryzhov, Soliton and 2D Domains in Ultra-Thin Magnetic Films (e-print arhiva, cond-mat/9612204)
- D6. M. Hashimoto, H. Qiu, H. Nakai and H. Maruyama, *Thin Solid Films* **254** (1995) 224
- D7. C. Pescher, J. Pierre and A. Ermolieff, *Thin Solid Films* **278** (1996) 140

Istraživanja konkretnih struktura:

- D8. A.B. Willemsen, J.S. Derov, S. Sridhar, Critical State Flux Penetration and Linear Microwave Vortex Response in $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ Films, *Phys. Rev. B* (1997) - submitted (e-print arhiva, super-con/9609002)
- D9. E.D. Bauer, F. Bridges, C.H. Booth, J.B. Boyce, T. Claeson, G. Brorsson, Y. Suzuki, Local Structure Study About Co in $YBa_2Cu_{1-x}Co_x3O_{7-\delta}$ Thin Films Using Polarized XAFS, *Phys. Rev. B* (1997) - submitted (e-print arhiva, cond-mat/9603104)
- D10. H.T. Lihn, S. Wu, S. Kaplan, H.D. Drew, Measurement of the Far Infrared Magneto- Conductivity Tensor of Superconducting $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ Thin Films (e-print arhiva, cond-mat/9510045)
- D11. Y. Sato and S. Sato, *Thin Solid Films* **281-282** (1996) 445
- D12. G. Masse, K. Djessas, K. Guenoun and A. Smith, *Thin Solid Films* **278** (1996) 86