

D-415

UNIVERZITET U NOVOM SADU  
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET  
INSTITUT ZA FIZIKU

УНИВЕРЗИТЕТ У НОВОМ САДУ  
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ

ПРИМЉЕНО:	25 СЕП 2002
ОРГАНИЗ.ЈЕД.	Б Р О Ј
0603	9/294

DIPLOMSKI RAD

GUSTINA FONONSKIH STANJA  
U KRISTALNIM FILMOVIMA

MENTOR

PROF. DR JOVAN ŠETRAJČIĆ

KANDIDAT

MILE ŠUBARA

NOVI SAD, 2002. godine

*Koristim priliku da se zahvalim supruzi i ostaloj porodici na strpljenju, razumevanju i podršci, kao i mom mentoru prof. dr Jovanu Šetrajiću, na pomoći u toku izrade ovog diplomskog rada.*

## Sadržaj

<b>1 U v o d</b>	<b>4</b>
<b>2 Fononi u kristalima</b>	<b>5</b>
2.1 Fononi u neograničenim strukturama . . . . .	5
2.2 Formiranje fononskog modela . . . . .	6
2.3 Zakon disperzije fonona . . . . .	7
<b>3 Fononi u kristalnim filmovima</b>	<b>10</b>
3.1 Analiza fononskog modela . . . . .	10
3.2 Spektri i stanja fonona u filmu . . . . .	13
<b>4 Gustina fononskih stanja</b>	<b>15</b>
4.1 Fononska stanja balka . . . . .	15
4.2 Fononska stanja filma . . . . .	16
<b>5 Z a k l j u č a k</b>	<b>17</b>
<b>6 L i t e r a t u r a</b>	<b>18</b>



## 1 U v o d

Teorijska i eksperimentalna istraživanja osobina niskodimenzionih sistema (superrešetke, tanki filmovi, kvantne žice i kvantne tačke), postala su u poslednjoj deceniji veoma intenzivna, pa bi se moglo reći da predstavljaju jedan od udarnih pravaca istraživanja u savremenoj fizici kondezovane materije. Razlozi interesovanja za ovakve sisteme, kao realnije strukture od neograničenih, su mnogobrojni, ali ipak treba izdvojiti sledeća tri.

Visokotemperaturni superprovodnici, koji su otkriveni pre desetak godina, predstavljaju slojevite strukture, tj. oni su skup slabo-interagujućih tankih filmova. Logično je pretpostaviti da se u fizičkim karakteristikama tankih filmova kriju koreni visokotemperaturne superprovodnosti.

Drugi razlog naraslog interesovanja za tanke filmove je nagli razvoj tehnike i tehnologije sintetizovanja ovih struktura. Danas se bez većih teškoća mogu napraviti tanki filmovi sa svega nekoliko atomskih slojeva.

Treći razlog je takodje izazvan tehnološkim napretkom. Novije eksperimentalne tehnike, a pre svega epitaksija molekulskim snopom, izvanredno su usavršene, tako da se parametri strukture od značaja u konkretnom problemu mogu menjati „po volji”.

Kako fononi predstavljaju osnovna pobudjenja u kristalima i fononski podsistem je u njima uvek prisutan, ispitivanje udela i uticaja fononskog podsistema na fizičke karakteristike materijala poseduje veliki značaj za teoriju čvrstog stanja. U ovom radu izvršena je analiza fononskih spektara u kristalnim filmovima na bazi metoda dvovremenskih temperaturnih retardovanih Grinovih funkcija. Ovaj metod, iako računski složeniji od uobičajenog prilaza u kome se ispituje jednočestična talasna funkcija, odabran je iz sledećih razloga.

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

Da bi se izučile posebnosti karakteristika fonona u kristalnim filmovima, moraju se prethodno spomenuti te iste karakteristike u neograničenim kristalnim strukturama i na osnovu toga izvršiti poredjenje ovih struktura. U radu su posebno izučene i određene mikroskopske termodinamičke osobine: gustina fononskih stanja i Debajevе frekvencije, koje definišu makroskopska svojstva datog uzorka.

## 2 Fononi u kristalima

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

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

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

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

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

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

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

### 2.1 Fononi u neograničenim strukturama

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

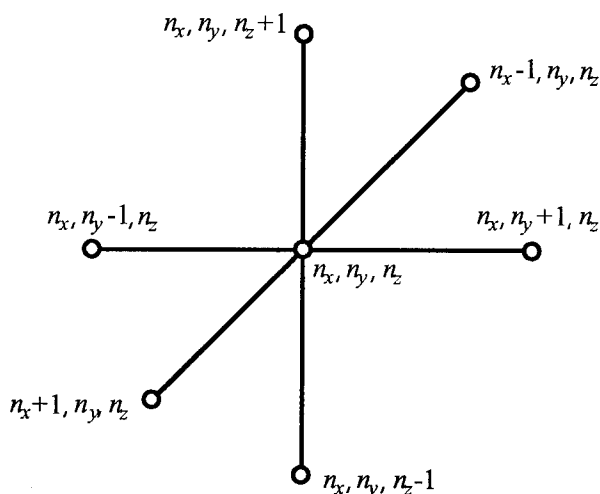
## 2.2 Formiranje fononskog modela

Iako u prirodi nema čistih izotropnih kristala, niti se oni mogu na današnjem nivou tehnologije proizvesti, proučavanje ovakvih idealnih beskonačnih struktura je opravdano. Na osnovu ovakvih istraživanja dobija se kvalitativna slika osnovnih fizičkih fenomena, a zaključci dobijeni na taj način, kao i primenjeni matematički formalizam, mogu se prenositi na neidealne strukture, a pre svega na kristalne strukture sa narušenom translacionom simetrijom.

Idealne beskonačne strukture su kristali sa osobinom translacione invarijantnosti u tri uzajamno nekomplanarna pravca. Ovi pravci, koji se uvode u kristalografiji, ne moraju biti uzajamno ortogonalni, pa se zato u teorijskoj fizici kondenzovane materije uvodi dodatni Dekartov sistem. U ovom radu će biti posmatran samo kristal sa kubnom simetrijom, kada su kristalografski pravci uzajamno ortogonalni i ovih problema nema. S obzirom na to, hamiltonijan sistema u aproksimaciji najbližih suseda (2.6) može da se napiše u obliku:

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

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



Slika 2.1: Atom u okruženju najbližih suseda

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

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

pri čemu su:

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

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

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

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

### 2.3 Zakon disperzije fonona

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

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

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

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

Uzimanjem  $t' = 0$  i Furije transformacijom  $t \rightarrow \omega$  u obliku:

$$F(t) = \frac{1}{2\pi} \int d\omega e^{-i\omega t} F(\omega),$$

poslednji izraz prelazi u jednakost:

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

koja je zadovoljena za:

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

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

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

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

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

i zamenom nadjenih komutatora u jednačinu (2.13) sledi:

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

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

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



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

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

Ova jednakost je ispunjena za:

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

odnosno:

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

Iz jednačine (2.17) polovi Grinovih funkcija se nalaze kada se imenioci izraza u uglastoj zagradi izjednače sa nulom. Rešavanjem tog uslova po  $\omega \equiv \omega_{\alpha}(\vec{k})$  dobija se traženi zakon disperzije fonona:

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

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

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

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

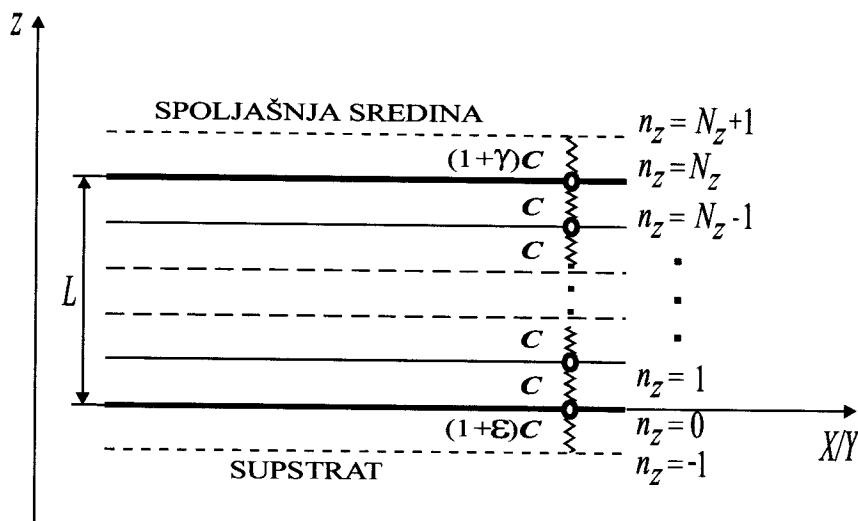
$$\mathcal{E}_{\alpha}(\vec{k}) = a k, \quad (2.20)$$

što predstavlja tipičan i poznat izraz za zakon disperzije akustičkih fonona<sup>1</sup>.

<sup>1</sup>Kvanti mehaničkih pobudjenja sa linearnim zakonom disperzije se nazivaju **akustičkim fononima**. Pored njih u kristalima složene strukture se javljaju i **optički fononi**.

### 3 Fononi u kristalnim filmovima

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



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

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

#### 3.1 Analiza fononskog modela

Posmatra se idealni<sup>2</sup> tanki film kubne kristalne strukture načinjen na supstratu nekim tehničko-tehnološkim postupkom (naparavanjem, spaterovanjem i sl.), čiji su osnovni kristalografski podaci:

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

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

$$C_{N_z,N_z+1} = C_{N_z+1,N_z} = (1+\gamma)C, \quad C_{-1,0} = C_{0,-1} = (1+\epsilon)C; \quad \epsilon, \gamma \geq -1,$$

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

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

<sup>2</sup>Pojam - idealni, koristi se u smislu nenarušenja kristalne strukture (bez prisustva defekata, primesa i sl.), a ne u smislu njene prostorne neograničenosti.

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

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

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

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

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

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

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

gde je  $T$  - standardan kinetički član. Potencijal koji uključuje interakcije sa graničnim slojevima je oblika:

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

Potencijal sa interakcijama koje obuhvataju unutrašnje slojeve je onda sledećeg oblika:

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

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

za pomeraje i impulse atoma (2.11), kao i ostale neophodne osnovne definicije, izračunavaju se potrebni komutatori impulsa i hamiltonijana.

Za donju graničnu površinu za koju je  $m_z = 0$ :

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

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

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

i konačno, za gornju graničnu površinu za koju je  $m_z = N_z$ , dobijamo:

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

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

- za  $n_z = 0$ ,

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

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

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

- za  $n_z = N_z$ ,

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

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

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

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

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

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

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

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

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

### 3.2 Spektri i stanja fonona u filmu

Da bi se odredio spektar dozvoljenih fononskih energija, koji se dobija iz (3.12) i na osnovu osobina Grinovih funkcija, potrebno je naći polove traženih Grinovih funkcija. Jasno je da se ovo svodi na odredjivanje korena (nula) determinante (3.13), odnosno rešavanje jednakosti:

$$\mathcal{D}_{N_z+1}(\varrho; \varepsilon, \gamma) \equiv 0 \implies \varrho = \varrho_\nu(\varepsilon, \gamma); \quad \nu = 1, 2, 3, \dots, N_z + 1. \tag{3.14}$$

Ovaj zadatak u opštem slučaju nije analitički rešiv (može se rešiti numerički za zadate parametre:  $\varepsilon$ ,  $\gamma$  i  $N_z$ ).

U slučaju modela slobodnih površina, kada su:  $\varepsilon = \gamma = 0$ , ovaj problem ima analitičko rešenje:

$$\mathcal{D}_{N_z+1}(\varrho) = \varrho \mathcal{P}_{N_z}(\varrho) - \mathcal{P}_{N_z-1}(\varrho) \equiv \mathcal{P}_{N_z+1}(\varrho). \tag{3.15}$$

Determinanta (3.13) sistema jednačina (3.11) se izražava direktno preko karakterističnih polinoma Čebiševca reda  $N_z$ . Iz uslova (3.14) slede nule Čebiševljevih polinoma, a uzimajući u obzir i izraz (3.12), jednostavnim algebarskim transformacijama dolazi se do izraza koji daje zakon disperzije fonona u tankom (strukturno nedeformisanom) filmu:

$$\mathcal{E}_\nu^\alpha(\vec{k}) \equiv \frac{\omega_\nu^\alpha(\vec{k})}{\Omega_\alpha} = 2 \sqrt{\mathcal{R} + \mathcal{S}(\nu)}; \tag{3.16}$$

$$\mathcal{R} \equiv \sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y}{2}; \quad \mathcal{S}(\nu) \equiv \sin^2 \frac{ak_z(\nu)}{2}.$$

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

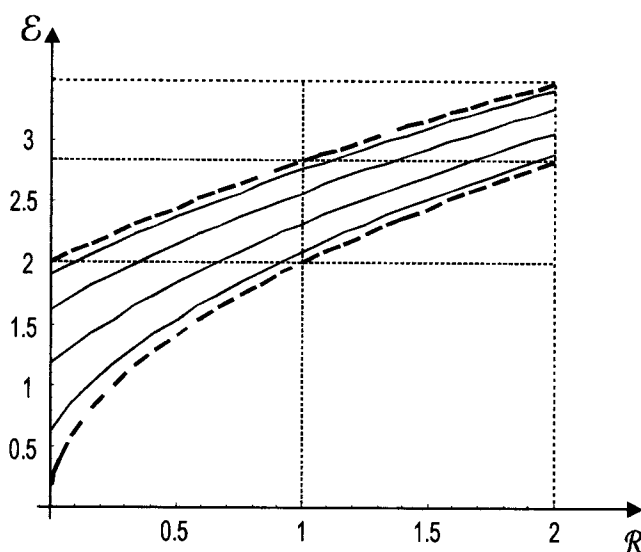
$$k_z(\nu) = \frac{\pi}{a} \frac{\nu}{N_z + 2}; \quad \nu = 1, 2, 3, \dots, N_z + 1. \quad (3.17)$$

Pored toga, uočava se da je:  $k_x^{min} = k_y^{min} = 0$ ;  $k_z^{min} \equiv k_z(\nu = 1) = \frac{\pi}{a} \frac{1}{N_z + 2} > 0$ , pošto je u pitanju tanak film, odnosno  $N_z \ll (N_x, N_y)$ , i:  $k_x^{max} = k_y^{max} = \frac{\pi}{a}$ ;  $k_z^{max} \equiv k_z(\nu = N_z + 1) = \frac{\pi}{a} \frac{N_z + 1}{N_z + 2} < \frac{\pi}{a}$ . Između minimalne i maksimalne vrednosti za  $k_z$ , pa prema tome i za  $\mathcal{E}_\nu(\vec{k})$ , postoji još  $N_z - 1$  diskretnih vrednosti<sup>3</sup>. To znači da fononi u tankim filmovima poseduju „donji” energetski gep:

$$\Delta \equiv \Delta_{min} = \mathcal{E}_1^\alpha(k_x = k_y = 0, k_z = k_z^{min}) = 2 \sin \left[ \frac{\pi}{2(N_z + 2)} \right], \quad (3.18)$$

kao i „gornji”, ali fizički manje interesantan gep.

Na osnovu ovih rezultata zakon disperzije (3.16) grafički je prikazan na slici 3.2 i to: za idealne beskonačne strukture (2.19) - isprekidanim linijama, između kojih je on kontinualan, i za tanki film (3.16) - punim linijama, on je diskretan.



Slika 3.2: Fononski spektar  $\mathcal{E} = \mathcal{E}_\nu(\mathcal{R})$  i parametrom  $\mathcal{S}(\nu)$

Primetni su gepovi i energetska diskretnost (za film), koji su isključiva posledica postojanja prostornih granica.

<sup>3</sup>Ukupan broj mogućih vrednosti kvaziimpulsa  $k_z$  jednak je broju energetskih i dvodimenzionih podzona:  $N_z + 1$ .

## 4 Gustina fononskih stanja

### 4.1 Fononska stanja balka

Funkcija spektralne gustine fonona daje raspodelu broja fonona sa različitim energijama na skali frekvencije:

$$D_i(\omega) \equiv \frac{dn_i}{d\omega}; \quad n_i = \frac{N_i}{V}, \quad (4.1)$$

gde je  $N_i$  broj stanja u svim granama spektra (akustičkih i optičkih) za datu frekvenciju, a  $V = N_i a^3$  zapremina, u opštem slučaju se može izraziti kao:

$$D_i(\omega) = V \sum_{\alpha} \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \delta(\omega - \omega_{\vec{k}}). \quad (4.2)$$

Gustina stanja se uvek može izračunati<sup>4</sup> ako se zna zakon disperzije  $\omega = \omega_{\vec{k}} \equiv \omega(\vec{k})$ .

Korišćenjem izraza za gustinu fononskih stanja kompaktno se može formulisati Debajeva aproksimacija i njena ograničenja.

- Sve tri akustične grane spektra karakteriše u dugotalasnoj aproksimaciji linearni zakon disperzije  $\omega_{\vec{k}} = vk$ .
- Talasni vektori fonona leže u sferi radijusa  $k_D$ , a ne u celoj I Brilluonovoj zoni.

Tada izraz (4.2) postaje jednostavniji:

$$\begin{aligned} D_D^i(\omega) &= \frac{V}{(2\pi)^3} \int_0^{\pi} \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{k_D} k^2 dk \delta(\omega - vk) = \\ &= \begin{cases} \frac{V}{2\pi^2} \frac{\omega^2}{v^3}, & \text{za } \omega < \omega_D^i = k_D^i v, \\ 0, & \text{za } \omega > \omega_D^i. \end{cases} \end{aligned} \quad (4.3)$$

Ako posmatrani uzorak sadrži  $N_i$  elementarnih ćelija tada je ukupni broj stanja akustičnih fonona jednak  $N_i$ , a Debajeva frekvencija se određuje iz uslova normiranja:

$$N_i = \int_0^{\omega_D} D_D^i(\omega) d\omega = \frac{V(\omega_D^i)^3}{6\pi^2 v^3},$$

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

$$\omega_D = \Omega \sqrt[3]{6\pi^2}; \quad \Omega \equiv \frac{v}{a}; \quad k_D^i = \frac{1}{a} \sqrt[3]{6\pi^2}. \quad (4.4)$$

Mada je stvarna gustina stanja vrlo daleko od Debajeve, ocena maksimalne frekvencije je ispravna po redu veličine. Zamena stvarne gustine stanja  $D_i(\omega)$  Debajevom  $D_D(\omega)$ , moguća je ako je kristal sa primitivnom elementarnom ćelijom.

<sup>4</sup>Gustina fononskih stanja se može izračunati i metodom Grinovih funkcija, a definiše se preko:  $D_{\vec{k}}(\omega) = M\hbar^{-1} \sum_{\vec{k}} g_{\vec{k}}(\omega)$ , gde je  $g_{\vec{k}}(\omega)$  spektralna funkcija Grinove funkcije. Ona se može izraziti kao:  $g_{\vec{k}}(\omega) = 2$

$\text{Re} \{G_{\vec{k}}(\omega + i\varepsilon)\} = \frac{\hbar}{2M\omega_{\vec{k}}} [\delta(\omega - \omega_{\vec{k}}) - \delta(\omega + \omega_{\vec{k}})]$  i normirana je na  $\int_0^{\omega_{D/A}} d\omega D_{\vec{k}}(\omega) = 1$ .



## 4.2 Fononska stanja filma

Za slučaj posmatranog filma, istim rezonom koji se primenjuje kod termodinamičke analize neograničenih sistema, koristimo sledeći prelaz (za broj dozvoljenih vrednosti  $\vec{k}$  po jedinici zapremine  $\vec{k}$  prostora):

$$D_f(\omega) = \frac{N_x N_y (N_z + 1)}{\Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{k_z^{min}}^{k_z^{max}} dk_z \int_0^{k_{max}} k dk \delta(\omega - \omega(k)), \quad (4.5)$$

gde je  $k_z^{max} = \frac{\pi}{a} \frac{N_z + 1}{N_z + 2}$ , a  $k_z^{min} = \frac{\pi}{a} \frac{1}{N_z + 2}$ . Uvodjenjem zakona disperzije u obliku  $\omega(k) = \Omega q$ , gde je  $q = \sqrt{a^2 k^2 + \Delta^2}$ , dobijamo izraz za gustinu stanja u obliku:

$$D_f(\omega) = \frac{N_f}{4\pi} \frac{N_z^f}{N_z^f + 2} \frac{\omega}{\Omega^2}. \quad (4.6)$$

Iz uslova normiranja prema kome je ukupan broj stanja jednak broju atoma,

$$N_f = \int_0^{\omega_D} D_f(\omega) d\omega, \quad (4.7)$$

nalazimo izraz za Debajevu frekvenciju i odgovarajući talasni vektor kod filma:

$$\omega_D^f = \Omega \sqrt{8\pi \frac{N_z^f + 2}{N_z^f}}; \quad k_D^f = \frac{1}{a} \sqrt{8\pi \frac{N_z^f + 2}{N_z^f}}. \quad (4.8)$$

Traženjem odnosa gustine fononskih stanja u idealnoj i film strukturi, ali baš na Debajevim frekvencijama,

$$\frac{D_f(\omega_D^f)}{D_i(\omega_D^i)} = \frac{\pi^{1/6} \sqrt{2}}{\sqrt[3]{36}} \frac{N_z^f}{N_z^i} \frac{N_z^f + 1}{N_z^f + 2} \sqrt{\frac{N_z^f + 2}{N_z^f}}, \quad (4.9)$$

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

$$D_f(\omega_D^f) \ll D_i(\omega_D^i).$$

Naravno, ovo važi uz pretpostavku da je brzina zvuka u obe sredine ista, tj. da je  $v_i \approx v_f$ . Slično nalazimo i odnos Debajevih frekvencija u oba posmatrana sistema:

$$\frac{\omega_D^f}{\omega_D^i} = \frac{\sqrt{8\pi}}{\sqrt[3]{6\pi^2}} \sqrt{\frac{N_z^f + 2}{N_z^f}}, \quad (4.10)$$

koji pokazuje da je:

$$\omega_D^f > \omega_D^i,$$

odnosno da Debajeva frekvencija ima nešto višu vrednost u filmu.

Kako su fononi sa Debajevim frekvencijama odgovorni za električno i toplotno transportna svojstva materijala, odavde sledi da će film struktura biti slabiji električni i toplotni provodnik od odgovarajućih masivnih struktura, ukoliko medju njima nema hemijskih, odnosno strukturnih razlika.



## 5 Z a k l j u č a k

U radu su istraženi i analizirani energetske spektri (moguća energetska stanja) fonona u kristalnim idealnim beskonačnim, tj. neograničenim i u ograničenim strukturama (filmovima), sa primitivnom kubnom rešetkom. Na osnovu ovoga se došlo do sledećih važnijih rezultata.

1. Ove analize su pokazale bitne razlike u zakonu disperzije fonona u pomenutim sistemima, kao isključive posledice postojanja granica odgovarajuće strukture, u kojima energetske spektri poseduju energetske gepove. Veličine gepova zavise od dimenzija uzoraka (debljine filma) i veoma brzo - praktično parabolčki, opadaju sa njihovim povećanjem.
2. Postojanje graničnih uslova ima za posledicu promenu energetske zone fonona. U odnosu na zonu dozvoljenih energija idealnih struktura sa praktično kontinualnim rasporedom, zona fononskih dozvoljenih energija u filmu je izrazito diskretna. Ona se sastoji od dvodimenzionalnih podzona. U svakoj od podzona energija uzima kontinualne vrednosti. Povećanjem broja slojeva filma povećava se broj diskretnih stanja unutar zone dozvoljenih energija.
3. Spektri fonona u film-strukturama poseduju donji (kao i jedan gornji) energetske gep. Posledica postojanja donjeg energetske gepa može da se tumači na sledeći način: on odgovara energiji osnovnog stanja fononske sistema i predstavlja najmanju energiju koju treba uložiti da bi se u filmu pojavili akustički fononi (optičkog tipa). Sve do te energije (aktivacione temperature) fononi se mogu nalaziti samo u nekim od vezanih stanja, npr. sa elektronima u Kuperovim parovima. Do te temperature ceo sistem se ponaša kao zamrznut.
4. Gustina fononskih stanja tankih filmova na niskim temperaturama je znatno manja od gustina fononskih stanja masivnih struktura. To znači da su usled prisustva granica fononi „pritisnuti” ili „potisnuti”. Oni verovatno mogu da se nadju samo u nekim vezanim ili spregnutim stanjima (npr. u vidu stojećih talasa).
5. Debajeva frekvencija, kao i intenzitet Debajevog talasnog vektora fonona u tankim filmovima na niskim temperaturama su veći (skoro dva puta) od odgovarajućih veličina kod masivnih struktura. To znači da su usled prisustva granica fononi „očvrsnuli” i postali još dugotalasniji.
6. Ovaj rezultat bi mogao da nadje neposrednu primenu. Sendvič od nekoliko filmova trebalo bi da obezbedjuje znatno bolju akustičku izolaciju nego masivna struktura iste debljine.

Ove analize su pokazale da je fononski udeo u termodinamičkim karakteristikama znatno manji u prostorno ograničenim strukturama nego u neograničenim i da se taj uticaj drastično uvećava sa smanjenjem prostornih dimenzija.

Tako npr. toplotna provodnost filma bi trebala da je znatno manja. Što se tiče električne provodnosti ona bi po Videman-Francovom zakonu trebalo da bude proporcionalna toplotnoj provodnosti. Na osnovu ovoga može se zaključiti da su tanki filmovi slabiji električni provodnici nego masivne strukture od istog materijala. Ovo može da bude značajno za efekat superprovodnosti, jer je poznato da su slabiji provodnici bolji superprovodnici.

## 6 Literatura

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

UNIVERZITET U NOVOM SADU  
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET  
KLJUČNA DOKUMENTACIJSKA INFORMACIJA

- Redni broj:  
RBR
- Identifikacioni broj:  
IBR
- Tip dokumentacije:  
*Monografska dokumentacija*  
TD
- Tip zapisa: *Tekstualni štampani materijal*  
TZ
- Vrsta rada: *Diplomski rad*  
VR
- Autor: *Mile Šubara, br.dos. 497/92*  
AU
- Mentor: *Dr Jovan Šetrajić, redovni profesor, PMF, Novi Sad*  
MN
- Naslov rada: *Gustina fononskih stanja u kristalnim filmovima*  
NR
- Jezik publikacije: *Srpski (latinica)*  
JP
- Jezik izvoda: *Srpski*  
JI
- Zemlja publikovanja: *Jugoslavija*  
ZP
- Uže geografsko područje: *Vojvodina*  
UGP
- Godina: *2002.*  
GO
- Izdavač: *Autorski reprint*  
IZ
- Mesto i adresa: *Prirodno-matematički fakultet, Trg D.Obradovića 4, 21000 N.Sad*  
MA
- Fizički opis rada: *(6/19/12/0/2/1/0)*  
FO
- Naučna oblast: *Fizika*  
NO
- Naučna disciplina: *Fizika čvrstog stanja*  
ND
- Predmetna odrednica / ključne reči:  
*kristalni filmovi, fononi, Grinove funkcije, spektri stanja, toplota*  
PO
- Čuva se: *Biblioteka Instituta za fiziku, PMF, Novi Sad*
- Izvod:  
*U radu je primenjen metod Grinovih funkcija za ispitivanje uticaja graničnih uslova na energetski spektar i moguća stanja fonona (fononski zakon disperzije) kod kristalnih filmova sa primitivnom kubnom ćelijom. Određena je gustina fononskih stanja i veličina Debajevih frekvencija. Dobijeni rezultati predstavljeni su grafički i izvršene su analize, odnosno njihova poredjenja sa odgovarajućim rezultatima u idealnim beskonačnim strukturama. Na osnovu toga uočene su najbitnije razlike između posmatranih sistema.*  
IZ
- Datum prihvatanja teme od strane Veća:  
*.09.2002.*  
DP
- Datum odbrane:  
*. .2002.*  
DO
- Članovi komisije:  
- Predsednik:  
*Dr Bratislav Tošić, redovni profesor, PMF, Novi Sad*  
- Članovi:  
*Dr Jovan Šetrajić, redovni profesor, PMF, Novi Sad*  
*Dr Radomir Kobilarov, redovni profesor, PMF, Novi Sad*  
KO

