

D-290

Природно-математички факултет
Радна заједница заједничких послова
НОВИ САД

Примљено: 27 -01- 1991.

Орг. јед.	Број	Пројекат	Вредност
03	10/12		

INSTITUT ZA FIZIKU
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET
UNIVERZITET U NOVOM SADU

MILKO BABIĆ

ELEKTRONSKI SPEKTRI
U SIMETRICNO DEFORMISANIM
STRUKTURAMA

DIPLOMSKI RAD

NOVI SAD - 1992.

Zahvaljujem se prof. dr. Jovanu Šetrajčiću na pomoći prilikom izbora teme i pisanja rada, kao i Jovanu Babiću za tehničku pomoć.

S A D R Z A J

1. UVOD	3
2. SUPERPROVODNOST.....	4
2.1 Osobine superprovodnika,.....	5
2.2 BCS Teorija.....	8
2.3 Oksidne keramike - visokotemperaturni superprovodnici.....	14
3. ELEKTRONSKI SPEKTRI.....	19
3.1 Elektroni u metalima.....	19
3.2 Elektroni u slojevitim strukturama.....	27
4. ZAKLJUČAK.....	39
5. LITERATURA.....	40



1. UVOD

Otkriće superprovodljivosti (1911), kao nov i neobičan fenomen, privukao je pažnju mnogih istraživača. Efekat koji se manifestovao samo u blizini absolutne nule trebalo je teorijski objasniti i ispitati mogućnost povišenja temperature prelaza iz superprovodnog u normalno stanje. Naravno, od početka cilj je bio postizanje superprovodljivosti na sobnim temperaturama. Takvi - superprovodni materijali omogućili bi ogromne uštede pri prenosu električne energije, a smatra se da bi u tehničkom smislu izazvali veće promene nego što je to učinila poluprovodnička i mikroelektronska tehnologija.

Početno oduševljenje ovom pojmom je ubrzo nestalo, jer napredovalo se vrlo sporo i prva uspešna teorija (BCS - model) pojavila se tek pedesetak godina nakon otkrića pojave. A ozbiljni skok u povišenju kritične temperature prelaza ostvaren je osamdesetih godina ovog veka otkrićem materijala koji superprovode na temperaturama iznad 77K, i time je ponovo podstaknuto istraživanje ovog fenomena. Kočnica daljem napredovanju je i nepostojanje teorije koja bi objašnjavala ovako visoke kritične temperature. Elektron - fonon interakcija, prema BCS - modelu, ne može da objasni postizanje kritičnih temperatura iznad 40K. Treba reći da ne postoji garancije da se ovaj makroskopski fenomen mora manifestovati na sobnim temperaturama. Novija istraživanja pokazuju da se u sistemu visokotemperaturnih keramika umesto akustičkih pojavljuju optičke fononske grane. U vezi s tim analizirani su fononski spektri u modelu strukture sa narušenim raspodelom masa kao i spektri elementarnih nanelektrisanja kojima je posvećen i ovaj rad.

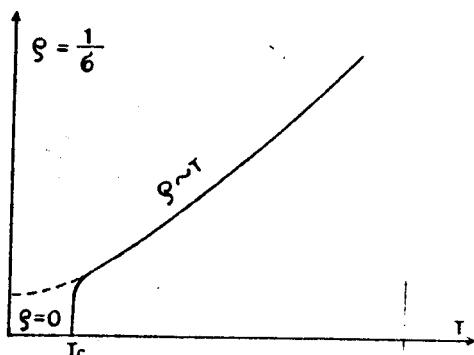
U odaljku 2 date su osnovne osobine superprovodnika kao i BCS teorija niskotemperaturne superprovodljivosti. Pored toga dati su i osnovni rezultati eksperimentalnog istraživanja superprovodnih keramika. Odeljak 3 sastoji se iz dva dela. U prvom delu obradeni su osnovni pojmovi o elektronskim spektrima u metalima a u drugom delu analiziran je sistem elektrona u simetrično deformisanim strukturama i određen energetski spektar i jednočestične funkcije stanja ovog sistema.

Model simetrično deformisanih struktura treba da reprezentuje strukturu kakva se sreće kod superprovodnih keramika.

2. SUPERPROVODNOST

Godine 1911. holandski fizičar Kamerling Onnes (Kamerlingh Onnhes) je, vršeci eksperimente sa tečnim helijumom, uočio da specifični otpor žive na temperaturi od približno 4 K pada na nulu. Ubrzo potom je nađeno da i mnogi drugi elementi ohlađeni ispod neke temperature – kritične temperature (T_c) imaju tu osobinu da im specifični otpor postaje praktično jednak nuli (Sl. 1.1.). Kroz takve provodnike električna struja protiče bez električnog otpora a to praktično znači da nema pretvaranja dela električne energije u toplotu, koji predstavljaju nepotrebne gubitke pri transportu ove energije. Takvi provodnici su na neki način idealni (bezotporni) provodnici električne struje i nazivaju se superprovodnici (SPR) a sama pojava naziva se superprovodljivost (SP). Na niskim temperaturama ova osobina nije retka i javlja se približno kod oko 1/4 elemenata (svi su metali) a do danas je poznato i oko 1000 legura i jedinjenja sa osobinom superprovodljivosti [1]. U tabeli I date su kritične temperature karakterističnih elemenata sa $T_c > 0.8$ K.

Елемент	T_c (K)
Al	1.19
Ga	1.09
Hg(α)	4.16
In	3.4
La(β)	6.0
Mo	0.92
Nb	9.2
Pa	1.4
Pb	7.2
Re	1.7
Sb	2.6
Sn	3.72
Ta	4.4
Tc	8.0
Th	1.4
Tl	2.38
V	5.3
Zn	0.86



Sl. 1.1

Tabela I

Iz tabele I se vidi da, kod čistih metala, najveću kritičnu temperaturu ima Nb sa $T_c=9.2$ K. Potraga za superprovodnicima sa višim kritičnim temperaturama doveća je najpre do jedinjenja NbN, sa $T_c=15$ K a zatim, tokom pedesetih i šezdesetih godina ovog

veka, otkriveno je više superprovodnih legura (Nb - Cr, Nb - Ti i druge) i jedinjenja sa sastavom Nb_3X ili V_3X , X-neprelezni metal (Al, Sn, Ga, ili Ge). Međutim kritične temperature ovih legura i jedinjenja bile su još daleko ispod 77 K, što je temperatura ključanja tečnog azota. Azot je poznat kao jevtin i lako dostupan rashladivač, za razliku od tečnog helijuma, i njegova primena bi umnogome olakšala održavanje superprovodnog stanja.

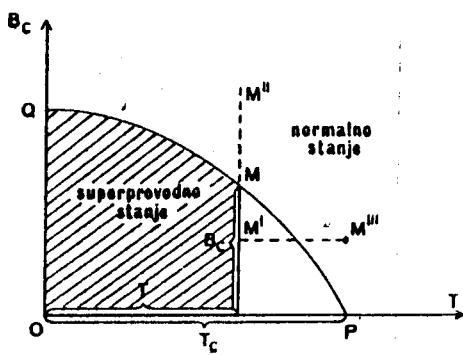
Do otkrića visokotemperaturnih superprovodnika ($T_c > 77$ K) je i došlo osamdesetih godina i to sa istraživanjem posebne klase materijala - metalnih oksida. O tome će biti više reči u odeljku 1.3.

2.1 Osobine superprovodnog stanja

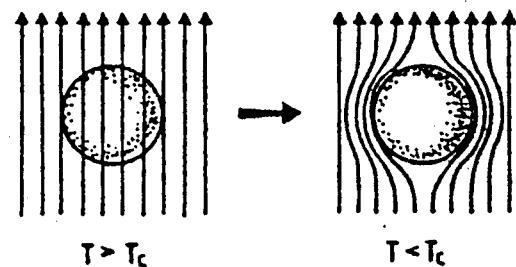
Superprovodno stanje (SP) ima pored odsustva električnog otpora, još čitav niz novih osobina ali će ovde biti ukratko navedene samo one najvažnije.

a) Magnetopolje razrušava SP stanje : indukcija (Be) magnetnog polja pri kojoj SPR prelazi u normalno (NR) stanje zavisi od temperature (slika 1.2).

Približna zavisnost ovog prelaza je oblika : $B_c = [1 - (T/T_c)^2]$; $T \leq T_c$. Sa slike 1.2 se vidi da sa povećanjem temperature (u oblasti $T < T_c$) opada indukcija magnetnog polja koja je potrebna da razori SP stanje. Na temperaturi $T = T_c$ superprovodnik prelazi u NR - nesuperprovodno stanje i pri $B=0$.



Slika 1.2



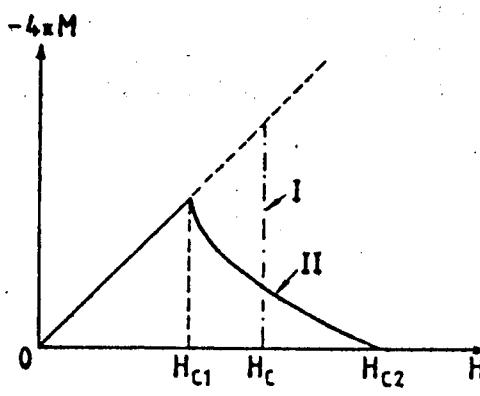
Slika 1.3

b) U unutrašnjosti provodnika u SP stanju indukcija magnetnog polja uvek je jednak nuli, tj. spoljašnje magnetsko polje ne prodiri u superprovodnik (pod uslovom da je $B < B_c$, za datu temperaturu). Ako se provodnik, u normalnom stanju, nalazi u magnetskom po-

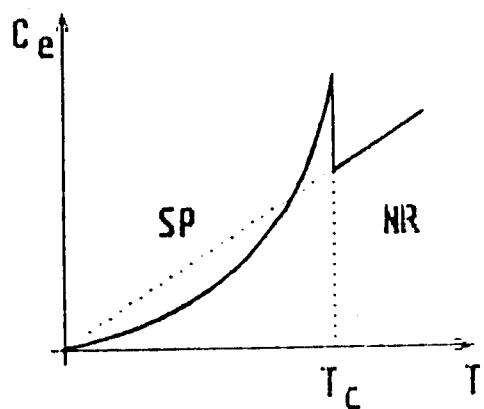
lju istiskivanje magnetnog polja iz njegove unutrašnjosti moguće je izvesti smanjivanjem indukcije ovog polja (sl. 1.20) pri stalnoj temperaturi $T < T_c$ od M'' do M' , ili hladjenjem superprovodnika pri stalnoj indukciji $B < B_c$, od tačke M''' do M' (na sl. 1.20). Ova pojava je poznata pod imenom Majsnarov efekat (Meissner, 1933) i prikazana je na sl. 1.3.

Fizičko objašnjenje ovog efekta je u tome da se u površinskom sloju superprovodnika indukuju takve superprovodne struje koje u potpunosti ekraniraju spoljašnje magnetno polje. Pošto je u unutrašnjosti SPR $B=0$, on se ponaša kao idealni dijamagnetik. Ponašanje SPR u magnetnom polju, odnosno prisustvo Majsnarovog efekta, bitno razlikuje superprovodno stanje materijala od idealno provodnog stanja (čisto bezotpornog) koje ne istiskuje magnetno polje iz unutrašnjosti.

c) Krive magnetizacije (M) za superprovodnike date su na sl. 1.4. Kod superprovodnika I vrste magnetizacija se menja linearno sa promenom jačine magnetnog polja H . Kad spoljašnje magnetno polje dostigne jačinu H_c , ono prevodi uzorak u normalno stanje i magnetizacija postaje jednaka nuli (ispredidana linija). Kod superprovodnika II vrste (puna linija) fluks počinje da prodire u uzorak pri polju H_{c_1} koje je manje od polja H_c za SPR I vrste. Između H_{c_1} i H_{c_2} uzorak je u tzv. mešanom stanju i još uvek ima superprovodne osobine. Tek iznad H_{c_2} uzorak je u normalnom stanju. Vrednost H_{c_2} može biti 100 i više puta veća od vrednosti H_c . Zbog ove osobine SPR II vrste imaju daleko veću praktičnu primenu (npr. za izradu solenoida superprovodljivih magneta).



Sl. 1.4



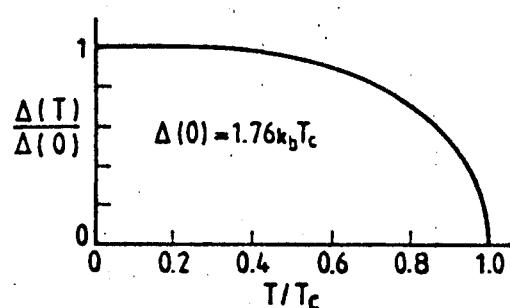
Sl. 1.6

d) Superprovodno stanje materijala se, pored jakim magn. poljem i temperaturom, može razrušiti i propuštanjem el. struje čija je gustina veća od neke kritične vrednosti. Kritična gustina (j_c) el. struje na sličan način zavisi od temperature kao i kritična indukcija magnetnog polja (sl.1.2).

e) Merenja kritične temperature (T_c) za različite izotope nekog SPR su dovela do približne zavisnosti $T \sim M^{-\alpha}$. M - masa izotopa od kojih je formirana kristalna rešetka a $\alpha \approx 1/2$. To je tzv. izotopski efekat (1950.g). Ovo ukazuje na to da je nastajanje superprovodnog stanja povezano sa oscilacijama kristalne rešetke. Da se ne radi o interakciji sa rešetkom, ne bi bilo razloga da se T_c menja kada se masa jona menja promenom broja neutrona.

f) Toplotni kapacitet SP stanja manji je od topotognog kapaciteta normalnog stanja (sl.1.5). Kod normalnih provodnika na niskim temperaturama elektronski topotni kapacitet linearno zavisi od temperature $C_e^{NR} \sim T$, a kod superprovodnika zakon je eksponencijalan $C_e^{SP} \sim \exp(-b\Delta/k_B T)$, gdje je b numerički faktor reda jedinice. Eksponent Δ je vezan sa procepm u spektru eksitacija i to je tzv. energetski gеп.

Sa slike se vidi da u blizini kritične temperature topotni kapacitet trpi skok. Prelaz iz superprovodnog (SP) u normalno (NR) stanje je oštar što navodi na pomisao da se radi o kolektivnom ponašanju elektrona sa visokim stepenom korelacije i da je pobudjeno stanje odvojeno energetskim gепom (procepm Δ) od osnovnog stanja. Energetski gep zavisi od temperature (sl.1.6) i postoji više eksperimentalnih metoda, koje ubedljivo dokazuju njegovo postojanje.



Sl. 1.6

Postojanje energetskog gепa nije univerzalna osobina SP stanja i njegovu prirodu objašnjava BCS - teorija (odeljak 1.2).

2.2 BCS - teorija superprovodljivosti

Prvu uspešnu teoriju superprovodljivosti postavili su : Bardin, Kuper i Šrifer (Bardeen, Cooper, Schrieffer, 1957). Njihova teorija se umnogome oslanjala na teoriju Bogoliubova, koja objašnjava superfluidno kretanje (kretanje bez viskoznog trenja) tečnog He^4 (videti npr. u [1]). Teorija superfluidnosti (SF) bazirana je na osobini boze - čestica da se mogu naći u proizvoljno velikom broju na jednom energetskom nivou. Ukupni spin atoma He^4 je nula (boze - čestica) dok He^3 ima spin različit od nule i ne pokazuje SF osobine. Pošto svaki sistem teži da zauzme stanje najniže energije (nultog impulsa) sledi da će se atomi He^4 sakupljati u stanju sa nultim impulsom (u referentnom sistemu vezanom za tečnost, jer se tečnost kreće kao celina). Sakupljanje boze - čestica u stanju sa nultim impulsom naziva se Boze - kondenzacija, a sve čestice sa impulsom jednakim nuli obrazuju tzv. kondenzat.

Teorijska analiza SF stanja daje uslov za nastanak SF kretanja u obliku :

$$\min \frac{\epsilon_p}{p} > 0, \quad (2.2.1)$$

ϵ_p i p su energija i impuls elementarnih ekscitacija (nastale usled trenja), tj. tečnost će se kretati bez trenja samo ako se u njoj pojavljuju elementarne ekscitacije koje imaju pozitivan minimum fazne brzine, kako električni otpor nastaje, najvećim delom, rasejavanjem elektrona na jonima kristalne rešetke, a u SP stanju ovo rasejanje kao da izostaje, to izostajanje električnog otpora može se tretirati kao posledica superfluidnog kretanja nanelektrisanih čestica (elektrona). Na osnovu toga se došlo se na ideju da se i SP objasni efektima boze - kondenzacije elementarnih ekscitacija. Međutim, postavilo se pitanje: kako elektroni, koji su fermioni, mogu obrazovati kondenzat kad sakupljanje više fermiona na jednom energetskom nivou zabranjuje Paulijev princip? Odgovor je naden u pretpostavci da se ne kondenzuju elektroni već parovi elektrona koji imaju suprotan i spin i impuls. Ovakvi parovi imaju ukupni impuls jednak nuli i ponašaju se kao boze čestice, pa mogu da formiraju kondenzat. Osobine ovakvog para je

proučavao Kuper te se elektronski parovi sa suprotno usmerenim ukupnim impulsima nazivaju Kuperovim parovima. Još je trebalo objasniti kako je uopšte moguće da dođe do obrazovanja parova elektrona kada se zna da se elektroni, kao istoimena nanelektrisanja, odbijaju kulanovskim silama. ovaj veoma važan problem rešio je Frelih (Fröhlich, 1950), posebno uočivši da su metali koji u normalnom stanju imaju veći specifični otpor bolji superprovodnici (veće T_c) od metala koji imaju manji spec. otpor u normalnom stanju, a neki od najboljih provodnika u NR stanju (kao npr. Au) uopšte ne prelaze u SP stanje. Ispostavilo se da elektron - fonon interakcija, koja u normalnom stanju uzrokuje električni otpor, na niskim temperaturama djeluje suprotno.

Frelih je pokazao da na niskim temperaturama mogu da se javi privlačne sile između elektrona mehanizmom virtuelne elektron - fonon izmene i time omoguće obrazovanje Kuperovih parova. Da bi se pobliže izložila Frelihova teorija nastanka privlačnih sila između elektrona potrebno je formulisati hamiltonijan elektron - fonon interakcije (detaljnije videti u liter.[3]) koji u impulsnom prostoru ima oblik :

$$H_{int} = N^{-1/2} \sum_{\mathbf{kq}} F_{\mathbf{kq}} a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} (b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^+) \quad (2.2.2)$$

gde je:

$$F_{\mathbf{kq}} = -i \bar{W} (q/2Mv_s). \quad (2.2.3)$$

Ovde je uzeta u obzir interakcija elektrona i longitudinalne fononske grane, jer je ona dominantna u odnosu na interakciju elektrona sa transverzalnim fononima. Kompletan hamiltonijan sistema koji sadrži elektrone, mehaničke oscilacije (fonone) i njihovu uzajamnu interakciju može se napisati u sledećoj formi :

$$H = \sum_{\mathbf{k}} X_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} Y_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{k}} + N^{-1/2} \sum_{\mathbf{kq}} F_{\mathbf{kq}} a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} (b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^+) \quad (2.2.4)$$

Ovde su uvedena obeležavanja :

$X_{\mathbf{k}}$ - energija elektrona obračunata u odnosu na Fermi sferu:

$$x_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu, \quad (2.2.5)$$

μ - energija Fermijevog nivoa,

y_k - energija fonona:

$$y_k = \hbar \omega(k) = \hbar v_s k, \quad (2.2.6)$$

a_k^+ i a_k - operatori kreacije i anihilacije elektrona sa impulsom k
 b_k^+ i b_k - operatori kreacije i anihilacije fonona sa impulsom k .

Ideja da elektron - fonon interakcija može da izazove privlačne sile između elektrona mora biti potvrđena negativnim predznakom interakcionog člana. Frelih je, u vezi s tim, izvršio unitarnu transformaciju hamiltonijana (2.2.4) sa ciljem da elektron-fonon interakciju zameni nekom ekvivalentnom elektron-elektron interakcijom koja bi se provodila virtuelnom izmenom fonona između elektrona :

$$H_{eq} = e^{-S} H e^S \quad (2.2.7)$$

S - antiermitski operator ($S^+ = -S$) oblika

$$S = S_1 - S_1^+, \quad S_1 = \sum_{kq} \lambda_{kq} a_k^+ a_{k-q} b_q \quad (2.2.8)$$

Izraz (2.2.7) se razvija koristeći aproksimativni izraz za Vejlov identitet :

$$\begin{aligned} H_{eq} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} [S, [S, [\dots [S, H]]] \dots] \approx \\ &\approx H - [S, H] + \frac{1}{2} [S, [S, H]]. \end{aligned} \quad (2.2.9)$$

Proizvoljna funkcija λ_{kq} iz (2.2.8) odreduje se tako da se iz ekvivalentnog hamiltonijana eliminiše deo koji je linearan po fononskim operatorima:

$$\lambda_{kq} = N^{-1/2} F_{kq} (x_{k-q} - x_k + y_k)^{-1} \quad (2.2.10)$$

(Prilikom množenja komutatora u (2.2.10) članovi proporcionalni $a^+ a b^+ b$ se zanemaruju). Ako se dobijeni rezultat usrednji po fononskom vakumu, a to znači da se u račun uzimaju samo efekti spontane emisije fonona dobija se:

$$H = \langle 0 | H_{eq.} | 0 \rangle = \sum_{\mathbf{k}} X_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3} \Phi_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3} a_{\mathbf{k}_1}^+ a_{\mathbf{k}_2}^+ a_{\mathbf{k}_3} a_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3}$$

(2.2.11)

gde je:

$$\begin{aligned} \Psi &= \frac{F_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3} F_{\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_1} - \frac{1}{2} F_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3} F_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3}}{X_{\mathbf{k}_3} - X_{\mathbf{k}_1} + Y_{\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3}} + \\ &+ \frac{F_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3} F_{\mathbf{k}_3, \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_1} - \frac{1}{2} F_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3} F_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3}}{X_{\mathbf{k}_2} - X_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3} + Y_{\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3}} \end{aligned}$$

(2.2.12)

Ako se iz (2.2.11) izdvoji samo onaj deo koji odgovara procesima izmedju elektrona koji imaju suprotne impulse:

$$\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}; \mathbf{k}_2 = -\mathbf{k}; \mathbf{k}_3 = -\mathbf{q}; \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3 = -\mathbf{q}.$$

Konačno se dobija hamiltonijan efektivne elektron-elektron interakcije u sledećem obliku:

$$H = \sum_{\mathbf{k}} X_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \frac{|F_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}|^2 Y_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{(X_{\mathbf{k}} - X_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})^2 - Y_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^2} a_{\mathbf{k}}^+ a_{-\mathbf{k}-\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{q}}$$

(2.2.13)

Rezultat Frelihove transformacije je zamena elektron - fonon interakcije u originalnom hamiltonijanu (2.2.4) sa efektivnom elektron - elektron interakcijom u ekvivalentnom hamiltonijanu (2.2.13). Da li će interakcija biti privlačna zavisi od znaka drugog člana u ovom izrazu. On će biti negativan (privlačna interakcija) ako je imenilac negativan, a to se svodi na uslov :

$$|k-q|^2 \ll k_0^2 = \frac{2mv_s}{\hbar} \sim 10^8 \text{ m}^{-1}$$

(2.2.14)

gde je $v_s \approx 5 \cdot 10^3 \text{ ms}^{-1}$ - brzina akustičkog zvuka.

Dakle, elektron-elektron interakcija, koja nastaje kao rezultat virtuelne izmenе fonona izmedju elektrona, izaziva privlačenje izmedju elektrona sa suprotnim impulsima u domenu impulsa bliskih Fermijevim.

Bardin, Kuper i Šrifer su iskoristili Frelihove rezultate da bi formulisali modelni hamiltonijan elektronskog sistema koji bi trebao da objasni pojavu superprovodljivosti. U račun su uveli i elektronske spinove i u razmatranje uzeli samo one elektrone koji imaju suprotne i spinove i impulse. Tako hamiltonijan BCS - modela

ima oblik:

$$H = \sum_{\mathbf{k}} X_{\mathbf{k}} [a_{\mathbf{k}}^{+}(1/2) a_{\mathbf{k}}(1/2) + a_{-\mathbf{k}}^{+}(-1/2) a_{-\mathbf{k}}(-1/2) - \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{kq}} w_{\mathbf{kq}} a_{\mathbf{k}}^{+}(1/2) a_{-\mathbf{k}}^{+}(-1/2) a_{-\mathbf{q}}(-1/2) a_{\mathbf{q}}(1/2)], \quad (2.2.15)$$

pri čemu je:

$$w_{\mathbf{kq}} = \begin{cases} w > 0 & k_f - k_g \leq \mathbf{k}, \mathbf{q} \leq k_f + k_g \\ 0 & \text{van tog intervala,} \end{cases} \quad (2.2.16)$$

k_g - granični impuls Fermi sfere i $k_g \ll k_0 \sim 10^8 \text{ m}^{-1}$.

Ako se u (2.2.15) izvrši kanonička transformacija Fermi-operatorka a^+ i a :

$$\begin{aligned} a_{\mathbf{k}}(1/2) &= u_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}(1) + v_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{+}(2) & a_{\mathbf{k}}^{+}(1/2) &= u_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{+}(1) + v_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}(2) \\ a_{-\mathbf{k}}(-1/2) &= u_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}(2) + v_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{+}(1) & a_{-\mathbf{k}}^{+}(-1/2) &= u_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{+}(1/2) - v_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}(1) \end{aligned} \quad (2.2.17)$$

sa $u_{\mathbf{k}}$ i $v_{\mathbf{k}}$ - realnim i parnim funkcijama, koje zadovoljavaju uslov

$$u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2 = 1 \quad (2.2.18)$$

i ako se zanemare sve forme četvrtog reda po operatorima a^+ i a (interakcioni članovi višeg reda, koji prevazilaze početnu aproksimaciju), hamiltonijan BCS - modela se svodi na :

$$\begin{aligned} H_{BCS} = \sum_{\mathbf{k}} & (2X_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^2 - \Delta u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}) + \sum_{\mathbf{k}} [X_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) + 2\Delta u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}] [\alpha_{\mathbf{k}}^{+}(1) \alpha_{\mathbf{k}}(1) + \alpha_{\mathbf{k}}^{+}(2) \alpha_{\mathbf{k}}(2)] + \\ & + \sum_{\mathbf{k}} [2X_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} - \Delta(u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2)] [\alpha_{\mathbf{k}}^{+}(1) \alpha_{\mathbf{k}}^{+}(2) + \alpha_{\mathbf{k}}(2) \alpha_{\mathbf{k}}(1)], \end{aligned} \quad (2.2.19)$$

gde je obeleženo:

$$\Delta = \frac{w}{2N} \sum_{\mathbf{q}} u_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{q}}$$

"Stabilizacija" hamiltonijana (2.2.19) zahteva eliminaciju članova proporcionalnih $a^+ a^+$ i $a a$. To se postiže izjednačavanjem odgovarajućih koeficijenata sa nulom:

$$2X_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} - \Delta(u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) = 0.$$

Uzevši u obzir i (2.2.18), dolazi se do rezultata za transformacione funkcije:

$$u_k^2 = -\frac{1}{2} \left[1 + \frac{x_k}{(x_k^2 + \Delta^2)^{1/2}} \right], \quad v_k^2 = -\frac{1}{2} \left[1 - \frac{x_k}{(x_k^2 + \Delta^2)^{1/2}} \right],$$

$$u_k v_k = \frac{1}{2} \frac{\Delta}{(x_k^2 + \Delta^2)^{1/2}}$$
(2.2.20)

Na osnovu svega toga (2.2.19) prelazi u:

$$H_{BCS} = \sum_k \left[x_k - \frac{x_k^2 + \frac{1}{2} \Delta^2}{(x_k^2 + \Delta^2)^{1/2}} \right] + \sum_k (x_k^2 + \Delta^2)^{1/2} [\alpha_k^+ (1) \alpha_k (1) + \alpha_k^+ (2) \alpha_k (2)]$$
(2.2.21)

sa energijom elementarnih ekscitacija oblika:

$$\varepsilon_k = (x_k^2 + \Delta^2)^{1/2}$$
(2.2.22)

Izraz (2.2.21) se odnosi samo na uski sloj elektronskih impulsa, debljine $2k_g$ oko impulsa Fermi sfere (k_f), tj. $k \in [k_f - k_g, k_f + k_g]$, $k_g \leq 0,5 k_o$.

Zato se i izraz za elektronsku energiju približno može uzeti u obliku :

$$x_k \approx \frac{p_f}{m} (p - p_f)$$
(2.2.23)

Uvrštavajući (po veličini malu) promjenljivu $\nu = p - p_f$ u (2.2.23) izraz (2.2.22) prelazi u:

$$\varepsilon_k = (\Delta^2 + p_f^2 m^{-2} \nu^2)^{1/2} \approx \Delta + \frac{p_f^2 \nu^2}{2m\Delta}$$
(2.2.24)

Fazna brzina je onda (za $\Delta \neq 0$): $v_\Phi = \frac{E_\nu}{\nu} = \frac{\Delta}{\nu} + \frac{p_f^2}{2m^2 \Delta} \nu$

a njen minimum (nalazi se iz uslova $\frac{dv_\Phi}{d\nu} = 0$):

$$\min v_\Phi = 2^{1/2} \frac{p_f}{m}$$
(2.2.25)

Vidi se da fazna brzina elementarni ekscitacija, koje kreiraju operatori α^+ , ima pozitivan minimum, pa je uslov za superfluidno kretanje elektrona ispunjen. Time se i objašnjava nestanak električnog otpora na temperaturama koje su nešto iznad absolutne nule. Treba podvući da operatori α^+ i α kreiraju i anihiliraju Kuperove parove i da do njihive kondenzacije dolazi u stanju sa impulsom $p=p_f$.

Iz (2.2.24) sledi da obavezno $\Delta \neq 0$ da bi važio izraz (2.2.25),

a Δ (prag energije) se odreduje iz (2.2.20) i na apsolutnoj nuli iznosi:

$$\Delta(0) = 2 \frac{h}{m} k_f k_g \exp(-\frac{4\pi\hbar^2}{Wmk_f a^3}) \quad (2.2.26)$$

gde je $a^3 = V/N$. Vidi se da Δ raste sa porastom konstante efektivne elektron-elektron interakcije W .

Tipične vrednosti za Δ u BCS teoriji su reda 10^{-3} - 10^{-2} eV. Sa porastom temperature Δ opada, saglasno eksperimentalnim rezultatima i na nekoj temperaturi T_c postaje jednako nuli. Ta temperatura (T_c) u BCS teoriji iznosi približno 10 - 20 K, u naj-optimalnijim slučajevima do 40 K.

2.3 Oksidne keramike - visokotemperaturni superprovodnici

Početkom sedamdesetih godina bilo je poznato da neki oksidi imaju SP osobine, kao LiTi_2O_4 sa $T_c \approx 13.7\text{K}$ i $\text{BaPb}_1-x\text{Bi}_x\text{O}_3$ sa $T_c \approx 13\text{K}$ ali njihovo otkriće nije izazvalo veći interes. Tek je 1986.g. otkrivena superprovodna keramika La-Sr-Cu-O sa $T_c=40\text{K}$ a ovo povećanje T_c kod metalnih oksida prvi su ostvarili Bednorc (Bednorz) i Miler (Müller) u IBM laboratoriji u Švajcarskoj. OštRNA prelaza u SP stanje bila je $\Delta T=1.4\text{K}$.

Početkom 1987.g. u oksidu itrijuma (Y-Ba-Cu-O) ostvarena je kritična temperatura između 80 K i 93 K a rekorder je bila tzv. 1:2:3 struktura $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$. Time je preskočena temperatura ključanja tečnog azota (77K) tako da se novi materijali ne moraju hladiti skupim tečnim helijumom. Ubrzo nakon toga je nadeno da Y može biti zamjenjen nizom retkih zemalja uz vrlo malu promenu T_c . U toku 1988.g. ostvareni su oksidi Bi-Sr-Ca-Cu-O sa T_c iznad 100K i Tl-Ba-Cu-O sa temperaturom nultog otpora $T_c \approx 125\text{K}$.

Dobijanje SP keramika

Sve metode za dobijanje SP keramika koriste procese :

- 1) taloženje iz rastvora
- 2) pečenje praška.

Smeša rastvora azotnooksidsnih soli se obraduje rastvorom NaOH. Talog se posle toga ispira vodom da bi se udaljio Na. Nakon toga talog se suši, isitni i zagрева на температуру од $500\text{-}600^\circ\text{C}$. Coko

2 časa), ponovo isitni i presuje u tablete pri pritisku od oko 300 MPa. Zatim se žari na temperaturi od 900-1000°C na vazduhu u vremenu od 60 časova. Ponovo se, dva puta, sitni i presuje. Za sve tehnike dobijanja SP keramika je zajedničko to, da se prvo pravi mešavina oksida La, Ca, Ba ili Sr i Cu koja se više sati greje na temperaturama od 800-1000°C pa se tako obradeni oksidi drobe, homogenizuju zatim se mešaju i sinteruju na temperaturama od oko 1200°C.

Uzorci se najčešće sastoje od visokokvalitetnih zrna sa tipičnim linearnim dimenzijama reda 1-10 μm. Dakle, uzorci imaju zrnastu (granularnu) strukturu. Zrna su polikristalne strukture a između zrna se nalazi loš nestehiometrijski materijal. Većina uzorka izgleda kao da je "šupljikava" i ne deluje uređeno.

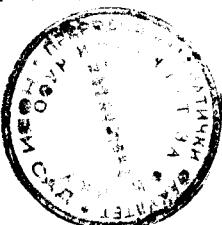
Karakteristike SP keramika

Neznatne promene fizičkih ili hemijskih uslova za vreme dobijanja SP keramika mogu potpuno da promene prirodu i karakteristike ovih materijala. Potresi prilikom rada ili dovođenje SP materijala na sobnu temperaturu i ponovno hlađenje mogu umnogome da promene osobine uzorka.

Postavlja se pitanje kako je uopšte moguće da metalni oksidi imaju SP osobine. SP oksidi su materijali koji formiraju planarne nivoе i u svakom nivou su atomi vezani atomima kiseonika. Ovakav slučaj imamo kod La-Sr-Cu-O sa $T_c \approx 40K$ zatim Y-Ba-Cu-O sa $T_c \approx 95K$, Bi-Sr-Ca-Cu-O sa $T_c \approx 110K$ i Ti-Ba-Ca-Cu-O sa $T_c \approx 125K$. U sva četiri slučaja postoji bakar-oksidne ravni u kojima je bakar u kvadrat-planarnoj koordinaciji. Drugi kation u ravni je Sr, Ba, Ca, La i drugi. Nivoi su zatim poredani jedan na drugi, i veza između nivoa je mnogo slabija nego u bakarnoj ravni.

Važno je istaći da za SP keramike na bazi bakar-oksida presudnu ulogu ima prisustvo perovskitne strukture (sl. 1.7).

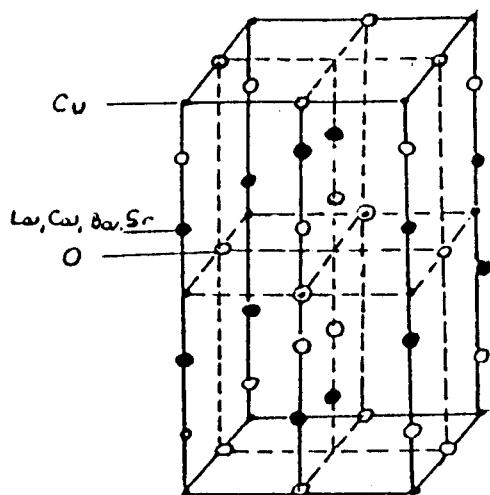
Prvi oksidni SPR bez bakra koji ima kubnu strukturu i nema planarnu bakar-oksidnu podrešetku (za koju se misli da je odgovorna za SP stanje u SPR zasnovanim na bakar-oksidu) bio je $Ba_{4-x}K_xBiO_{8-y}$ ($x \approx 0.4$) sa $T_c \approx 30K$. Međutim ispitivanja neutronskom difrakcijom sa promjenljivom koncentracijom kalijuma su pokazala da se superprovodljivost javlja jedino u kubnoj perovskitnoj fazi, koja je stabilna na približno 600°C i formira se za $x > 0.25$.



Kritična temperatura je najviša za sastav koji je vrlo blizu struktornog prelaza ($x \approx 0.25$) i opada sa povećanjem x .

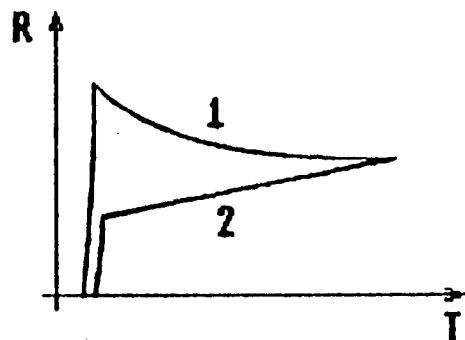
Pošto postoje i SP keramike bez bakra mogu se navesti neki uslovi koji moraju biti ispunjeni za pojavu SP osobina kod ovih keramika. Pre svega aranžira se takva gustina elektronskih stanja da se dobije širok pojas na Fermijevom nivou. Gustina stanja na Fermijevom nivou nije jedini kriterijum za pojavu SP stanja. Potrebno je da dođe i do sparivanja elektrona, a to je kod oksida obezbeđeno blizinom susednih bakarnih jona i njihovom mogućnošću da egzistiraju kao dvostruki ili trostruki joni što omogućuje jaku izmensku interakciju. Zamena La atomima II grupe je jedan od načina da se utiče na izmenu elektronskog afiniteta jona bakra.

Drugi način promene gustine elektronskih stanja u bakarnim ravnicama je izostavljanjem kiseonikovih atoma što objašnjava činjenicu da osobine SP keramika zavise od atmosfere u kojoj su stvorene (sl. 1.8).



Struktura K_2NiF_4 perovskit

Sl. 1.7



Sl. 1.8: Temperaturna zavisnost $R(T)$ za $(La_{0.9}Sr_{0.1})_2CuO_4$.

1 - za uzorak dobiten u vazduhu
2 - za uzorak dobiten u atmosferi kiseonika

Novi oksidni materijali su superprovodnici druge vrste sa veoma visokim vrednostima H_c^2 . Jedna od najvažnijih osobina SP keramika je da se njihove magnetne i transportne osobine mogu najbolje objasniti ako se oni posmatraju kao intergranularna mreža Džozefsonovih spojeva (videti liter. [4]). Ovo je važno zbog

praktične primene, jer SP keramike imaju nisku vrednost kritične gustine struje (kod koje se prvi put javlja napon na uzorku) pri $T \approx 77K$ i magnetnim poljima znatno većim od 1T. A da bi zamenili konvencionalne SPR, npr. u magnetima sa visokim poljima, je mora biti iznad $10^5 A/cm^2$ pod gornjim uslovima. Standardnim tehnikama se dobijaju polikristalni uzorci sa koje su za nekoliko redova veličine ispod traženih vrednosti, a samo u pojedinim - specijalno pripremljenim oksidima taj zahtev je prevaziđen. Razlog za niske vrednosti je je u slabim vezama, koje se javljaju usled zrnaste strukture keramičkih materijala. A jedan od najvećih metalurških problema kod spravljanja SP keramika je dobijanje što "čistijih" granica zrna da bi se ostvario što bolji intergranularni električni kontakt.

I kod SP keramika je ustanovljeno postojanje energetskog gепа (Δ) kao i njegova temperaturna zavisnost. Određivanje Δ je vršeno odbijanjem (refleksijom) i propuštanjem infracrvenog zračenja. Za jedinjenje $La_{1.38}Sr_{0.17}CuO_4$; $\Delta=5 \pm 0.5 meV$. Maksimalna vrednost veličine 2Δ dobijene za $La-Ba-Cu-O$ iznosi $4.7 meV$, a za $La-Sr-Cu-O$ $\Delta=8.3 meV$. Nađene vrednosti za Δ su znatno niže od one koju predviđa BCS - teorija za klasične SPR.

Pošto do tada postojeće teorije nisu predviđale postojanje SP osobina kod oksidni keramika, postavilo se pitanje da li i kod ovih SPR dolazi do formiranja Kuperovih parova. Eksperimenti sa tunelovanjem nosilaca nanelektrisanja vršeni na SP keramici $La_{1.85}Sr_{0.15}CuO_4$ kao i ispitivanja apsorpcije mikrotalasa [4], utvrdili su da je nanelektrisanje nosilaca $q=2e$ tj. potvrdili su postojanje Kuperovih parova. Takođe su merenja magnetnog fluksa, unutar i van uzorka načinjenog od $Y_{1.2}Ba_{0.8}CuO_4$, pokazala da je magnetni fluks kvantovan i da je nanelektrisanje nosilaca $2e$ [4].

U SP keramikama $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ i $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ utvrđeno je postojanje šupljina na kiseonikovim 2p nivoima, i to tako što su elektroni sa kiseonikovih 1s nivoa pobudivani energijom $528 eV$ (energetska razlika nivoa 1s i 2p). Ako na nivoima 2p postoji šupljina dolaziće do apsorpcije zračenja, u protivnom slučaju neće. Za $x=0$ i $\delta=0.5$ nije dolazilo do apsorpcije zračenja. Sa povećanjem x ili smanjenjem δ dolazilo je do apsorpcije, čime je demonstrirano postojanje šupljina na 2p nivoima. Ispitivanja zavisnosti kritične temperature od koncentracije šupljina su pokazala da ona raste sa

porastom koncentracije, ali da je njen porast ograničen maksimalnim brojem šupljina u dатoj strukturi.

Izotopski efekat je utvrđen i kod SP keramika ali u nešto drugačijem obliku. Za oksid $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_{4-y}$ važi $T_c \sim M^{-\alpha}$ ali je $\alpha \neq 0.5$ i pripada intervalu $0.14 < \alpha < 0.35$, dok je kod oksida $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ efekat vrlo slabo izražen ($\Delta T_c = 0.3\text{-}0.5\text{K}$). Ovo navodi na pomisao da se Kuperovi parovi ne obrazuju samo virtuelnom izmenom fonona, nego da postoje i druge interakcije odgovorne za visoku kritičnu temperaturu oksidnih keramika. Tim pre što su energije veze Kuperovih parova, prema BCS - teoriji, male (svega $10^{-9}\text{-}10^{-2}\text{eV}$) i ne mogu objasniti visoke kritične temperature oksidnih keramika. Za objašnjenje visokotemperaturne SP bili su predloženi različiti modeli ali problem ni do danas nije rešen. Neki aspekti ovog problema su razmatrani u odeljku 3.2.

3. ELEKTRONSKI SPEKTRI

Nesumnjivo je da se odgovor na pitanje mehanizma superprovodenja kod oksidnih keramika mora potražiti u fononskom podsistemu, u podsistemu elementarnih nanelektrisanja koja su ovde prisutna, kao i u njihovoj uzajamnoj interakciji. S obzirom da je superprovodna keramička struktura izraženo anizotropna, pokušali smo da konstruišemo teorijski model koji odražava prisutno narušenje translacione simetrije rasporeda molekula duž jednog pravca kristalne rešetke, različitost masa tih molekula i prisustvo dveju graničnih površina duž tog pravca.

Kako je fononski sistem u okviru ovog modela izučen [5,6], ovde ćemo se pozabaviti problemom elektrona.

3.1 Elektroni u metalima

Metali su poznati kao dobri provodnici električne struje i teorija metalnog stanja trebalo je da da odgovor na pitanje kako metali provode struju. Prva teorija metalnog stanja, koju je razradio Drude (P. Drude, 1900.) i usavršio Lorenc (H.A. Lorentz, 1904-1905.) oslanjala se na rezultate klasične fizike. Ovde će biti ukratko izložene osnovne zamisli te teorije, jer ona sadrži predstave o elektroprovodljivosti koje je sa neznatnim izmenama preuzela danas važeća tzv. zonska teorija metala.

U Drudeovoj teoriji metalnog stanja kristal se predstavlja trodimenzionom rešetkom pozitivnih metalnih jona. U prostoru između jona kreću se elektroni (koje su otpustili atomi metala) potpuno slobodno i haotično kao čestice idealnog gasa. Negativno nanelektrisani elektroni su raspodeljeni po celoj rešetki, a pozitivni metalni joni se održavaju na ravnotežnim rastojanjima. Privlačenje između pozitivnih jona i elektrona onemogućava elektrone da napuste površinu metala [7]. Ukupna energija elektrona u elektronskom gasu je negativna i sastoji se od potencijalne ($-W$) i kinetičke energije (ϵ). Potencijalna se smatra konstantnom (nezavisno od položaja slobodnog elektrona) pa stanje elektrona zavisi samo od njegove kinetičke energije. Elektroni

u elektronskom gasu mogu da menjaju svoju kinetičku energiju međusobnim elastičnim sudarima (kao čestice idealnog gasa) i to od najmanje do najveće, prema Boltmanovoj raspodeli. U električnom polju elektroni dobijaju komponentu ubrzanja u smeru električnog polja pa nastaje električna struja čija je gustina proporcionalna jačinu električnog polja:

$$j = \sigma E \quad (3.1.1)$$

što predstavlja Omov zakon u vektorskom obliku, sa električnom provodnošću σ . U uspeh Drudeove teorije spada i izračunavanje odnosa toplotne i električne provodnosti, koji je još od ranije poznat (eksperimentalno ustanovljen) kao zakon Videman - Franca (Wiedemann - Franz):

$$\frac{K}{\sigma} = \frac{\pi}{3} \left(\frac{k_B}{e} \right)^2 T \quad (3.1.2)$$

K - toplotna provodljivost

k_B - Boltmanova konstanta

e - nanelektrisanje elektrona

T - apsolutna temperatura

Ova teorija je pretrpela najveći neuspeh u objašnjenju toplotnog kapaciteta (specifične toplote) metala: molarni toplotni kapacitet metala (ako svaki atom otpušta po jedan elektron u elektronski gas) iznosi $3R+3R/2$, gde je $3R$ doprinos rešetke a $3R/2$ doprinos elektronskog gasa. Ali eksperimentalno je bilo poznato da molarni toplotni kapacitet metala iznosi vrlo približno $3R$ (Dilon - Ptijev zakon). Izgledalo je da elektroni ne učestvuju u prijemu topline koja se dovodi metalu. Pored ovog neuspела Drudeova teorija nije mogla da da ni pravilnu zavisnost električnog otpora od temperature. Prema njoj, on raste proporcionalno $T^{1/2}$, međutim bilo je poznato da električni otpor metala raste proporcionalno T . Ni detaljnija razrada teorije nije mogla da ispravi ove rezultate, pa je ovo bio kraj tzv. modela slobodnih elektrona.

Zomerfeld (A.Sommerfeld, 1928.) je prvi primenio kvantu statistiku Fermi-Diraka (E.Fermi, P.A.M.Dirac, 1926.) na elektronski gas i tako zasnovao kvantu teoriju metalnog stanja. U elektronskom gasu stanja elektrona se mogu razlikovati jedino po kinetičkoj energiji a po Fermi - Dirakovoj statistici samo dva elektrona, suprotnih spinova, mogu imati jednaku kinetičku energiju. To znači da u elektronskom gasu ne važi raspodela energija po Maksvel - Boltmanovoj kinetičkoj teoriji.

Krećanje elektrona u rešetki metala svodi se na problem elektrona u trodimenzionaloj potencijalnoj jami. Kvantna mehanika predviđa da elektron u ovom potencijalu (metalnoj kocki ivice L i dubine -W) može imati samo diskretnе vrednosti energije [8]:

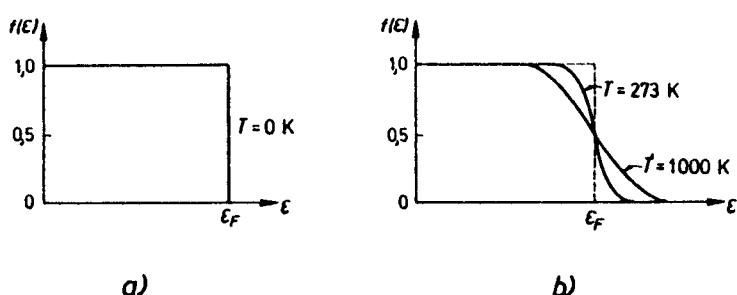
$$\epsilon = \frac{h^2}{8mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2); \quad n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \dots \quad (3.1.3)$$

h – Plankova konstanta

m – masa elektrona

Sva stanja sem osnovnog ($n_x = n_y = n_z = 1$) su višestruko degenerisana što znači da elektroni (u pobuđenim stanjima) imaju istu kinetičku energiju ali se različito kreću u odnosu na kristalnu rešetku.

Iz navedenog sledi da u elektronskom gasu samo dva elektrona imaju najnižu kinetičku energiju (čak i na apsolutnoj nuli), ostali elektroni popunjavaju više energetske nivoe – date sa (3.1.3) i to tako da se na svakom nivou mogu naći najviše dva elektrona sa suprotnim spinovima. Verovatnoća da je nivo kinetičke energije ϵ popunjeno data je Fermijevom funkcijom raspodele $f(\epsilon)$, koja je grafički predstavljena na sl. 3.1.



Sl. 3.1

Pri apsolutnoj nuli sva stanja do neke energije ϵ_F su popunjena sa po dva elektrona. Kinetička energija elektrona u najvišem popunjrenom stanju pri $T=0K$ naziva se Fermijeva energija i data je sa :

$$\epsilon_F = \frac{h^2}{8m} \left(\frac{3N}{\pi V} \right)^{2/3} \quad (3.1.4)$$

N – broj elektrona u elektronskom gasu zapremine $V=L^3$.

Fermijeva energija je konstanta za pojedini metal (zavisi samo od odnosa N/V) i, ako se pretpostavi da svaki atom daje po jedan elektron u elektronski gas, za bakar ona iznosi ≈ 2.5 eV. Čestice idealnog gasa (sa maksimalnom energijom) posedovale bi ovu energiju

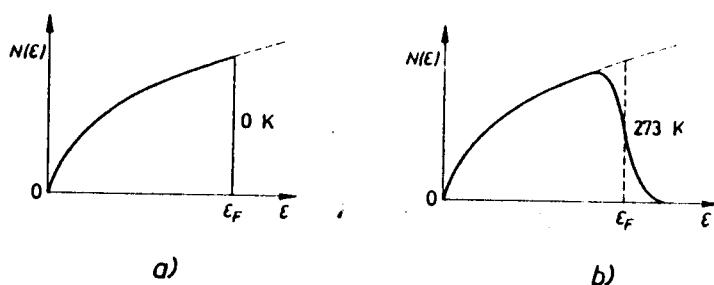
ju na $T=25000$ K pa je očigledna neprimenjivost kinetičke teorije na elektronski gas.

Na temperaturi $T \neq 0$ K deo elektrona u elektronskom gasu se pobudi i pređe sa nižih nivoa $\epsilon < \epsilon_F$ na susedne slobodne više nivoe $\epsilon > \epsilon_F$. Zbog toga se za nivoe $\epsilon < \epsilon_F$ verovatnoća $f(\epsilon)$ smanji, a za isto toliko se poveća verovatnoća $f(\epsilon)$ za nivoe $\epsilon > \epsilon_F$. Jednako je verovatno da je granični nivo ϵ_F popunjen ili prazan, pa je vrlo približno $f(\epsilon_F) = 1/2$ na svim temperaturama.

Elektronska stanja nisu ravnomerno raspodeljena po energijama, nego je broj stanja sa energijom između ϵ i $\epsilon + d\epsilon$ dat sa:

$$D(\epsilon)d\epsilon = \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \epsilon^{1/2} d\epsilon \quad (3.1.5)$$

$D(\epsilon)$ – funkcija raspodele stanja po energijama (sl. 3.2).



Sl. 3.2

Stanje kinetičke energije $\epsilon < \epsilon_F$ su jednako verovatna samo za temperaturu 0 K, za $T \neq 0$ K funkciju $D(\epsilon)$ treba množiti Fermijevom funkcijom $f(\epsilon)$ pa graf raspodele stanja po energijama nije odsečen, nego se završava krivom (sl. 3.2.b). Izračunata raspodela stanja po energijama potvrđena je eksperimentalno (npr. rendgenskim spektrom).

Prilikom zagrevanja metala elektroni se pobuduju energijom reda $k_B T$ i da bi mogli da prime ovu energiju, elektronima treba da stoje na raspolaganju nezauzeti nivoi čija je energija za približno $k_B T$ veća od njihove energije. To je ispunjeno samo za uzan sloj elektronskih stanja u blizini Fermijeve energije i to objašnjava vrlo mali doprinos elektrona toplotnom kapacitetu metala. On je osetan samo za vrlo niske i vrlo visoke temperature. Zbog svog impulsa elektroni posjeduju i talasne osobine, energija elektrona se može prikazati u obliku :

$$\epsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2); \quad k = \frac{2\pi}{\lambda}, \quad (3.1.6)$$

\mathbf{k} - talasni vektor ($k_x, k_y, k_z = 0, \pm 2\pi/L, \pm 4\pi/L, \dots$ za periodične granične uslove u kocki ivice L), a talasne funkcije slobodnog elektrona imaju oblik:

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = V^{-1/2} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (3.1.7)$$

i predstavljaju progresivne talase koji nose impuls $p=\hbar\mathbf{k}$. Pošto je Bragova refleksija tipična odlika talasnog kretanja u kristalima [3], do Bragove refleksije dolazi i za elektronske talase u kristalima što se manifestuje energijskim procepcima u spektru. Elektroni koji ispunjavaju Bragov uslov selektivne refleksije:

$$n\lambda = 2d \sin\theta \quad (3.1.8)$$

$$n = 1, 2, 3, \dots \text{ - red refleksije} \quad \lambda \text{ - talasna dužina}$$

d - međuravansko rastojanje paralelnih mrežnih ravnih za jedan niz paralelnih mrežnih ravnih, reflektuju se na njima i ne mogu proći kroz rešetku. U jednoj dimenziji Bragov uslov se svodi na:

$$k = \pm \frac{n\pi}{a} \quad (3.1.9)$$

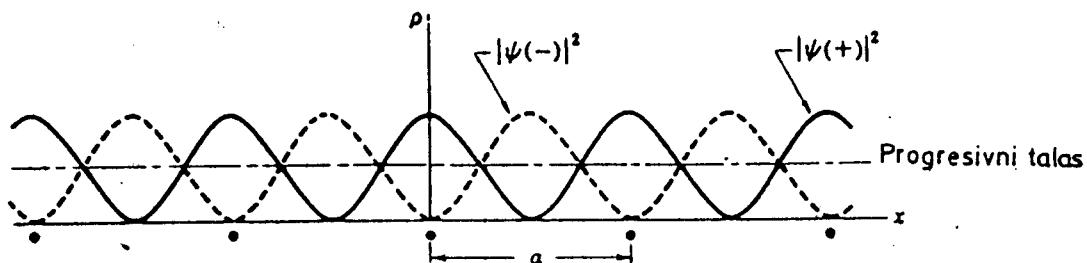
$n = 1, 2, 3, \dots \quad a$ - period jednodimenzione rešetke. Prva refleksija i prvi energetski procep se pojavljuje za $k = \pm \frac{\pi}{a}$, ostali energetski procepi se javljaju za druge vrednosti celog broja $n > 1$ u (3.1.9). Reflektovani elektroni se kreću u smeru $-x$ ali i u tom smeru ispunjavaju Bragov uslov i ponovo se reflektuju. Za $k = \pm n\pi/a$ talasne funkcije koje opisuju kretanje elektrona nisu progresivni talasi. Rešenja su stojeći talasi i to dva različita stojeća talasa koji se sastoje od progresivnih talasa $e^{i(n\pi/a)x}$ i $e^{-i(n\pi/a)x}$, odnosno:

$$\begin{aligned} \Psi(+)&\sim [e^{i(n\pi/a)x} + e^{-i(n\pi/a)x}] \sim 2\cos(n\pi/a)x \\ \Psi(-)&\sim [e^{i(n\pi/a)x} - e^{-i(n\pi/a)x}] \sim 2\sin(n\pi/a)x \end{aligned} \quad (3.1.10)$$

(+) - označava parnu funkciju a (-) neparnu funkciju (pri zamjeni x sa $-x$).

Stojećim talasima $\Psi(+)$ i $\Psi(-)$ odgovaraju u rešetki dva različita nivoa energije. Kvantno-mehanička gustina verovatnoće nađenja čestice je data sa $\rho = |\Psi|^2$ (sl. 3.3).

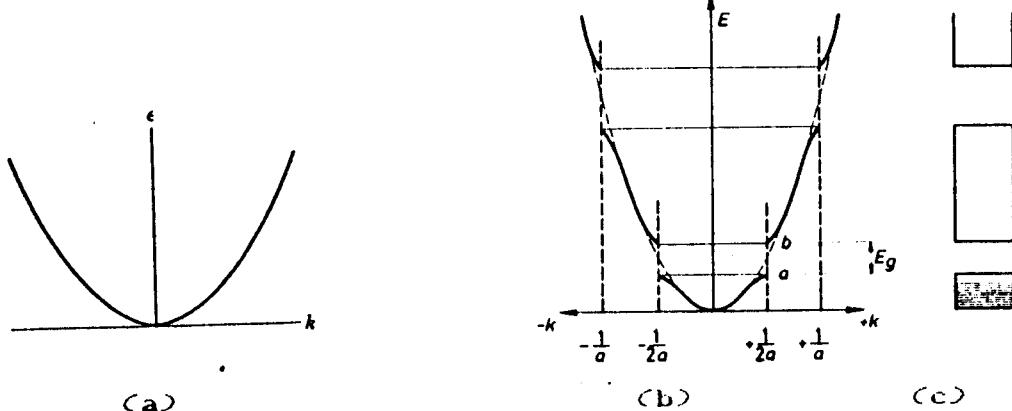
Izračunavajući prosečne vrednosti potencijalne energije za sve tri raspodele na elektrisnja nalazi se da je prosečna potencijalna energija za $\Psi(+)$ veća nego za progresivan talas dok će za $\Psi(-)$ potencijalna energija biti manja nego za progresivan talas.



Raspodela gustine verovatnoće ρ u rešetki za $|\psi(-)|^2 \propto \sin^2 \pi x/a$, $|\psi(+)|^2 \propto \cos^2 \pi x/a$ i za progresivni talas. Za talasnu funkciju $\psi(+)$ nanelektrisana su nagomilana oko pozitivnih jona, snižavajući time potencijalnu energiju u poređenju sa potencijalnom energijom progresivnog talasa. Za talasnu funkciju $\psi(-)$ nanelektrisana su nagomilana između jona, a uklonjena iz okoline jona, povišavajući time potencijalnu energiju u poređenju sa progresivnim talasom.

Sl. 3.3

Pošto se potencijalne energije za $\Psi(+)$ i $\Psi(-)$ razlikuju, postoji energijski precep između ova dva rešenja za $k=n/a$ i $k=-n/a$ (sl. 3.4).



Sl. 3.4: Grafik energije E u funkciji talasnog vektora k za slobodne elektrone (a), za elektrone u jednodimenzionaloj rešetki konstante a (b) i zone dozvoljenih i zabranjenih energetskih stanja elektrona (c)

Ako se postavi Šredingerova jednačina za kretanje elektrona u jednodimenzionaloj rešetki konstante a :

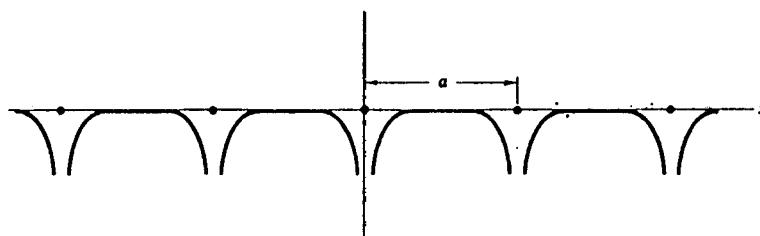
$$\left[-\frac{p^2}{2m} + V(x) \right] \Psi(x) = E \Psi(x) \quad (3.1.11)$$

i ako se uzme u obzir da je potencijalna energija periodična funkcija: $V(x)=V(x+a)$, kao na sl. 3.5, dobija se da talasne funkcije (rešenja Šredingerove jednačine) imaju oblik:

$$\Psi_k(x) = e^{ikx} u_k(x)$$

gde je $u_k(x) = u_k(x+a)$. Ako se rezultat uopšti na trodimenzionu rešetku [3] sledi:

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (3.1.12)$$



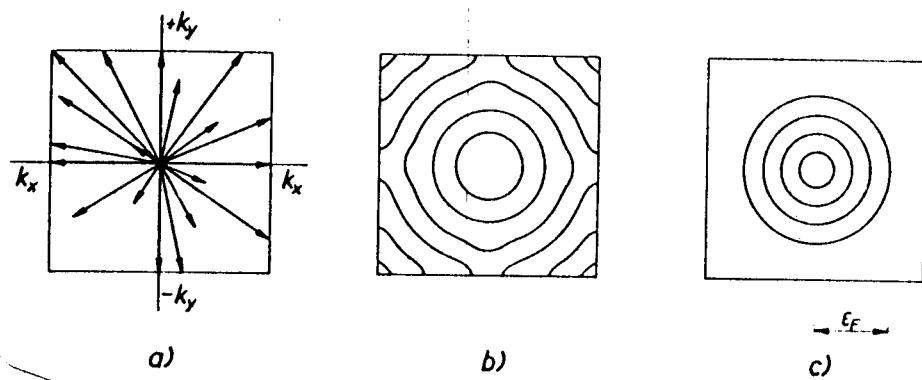
Sl. 3.5: Periodični potencijal linearne monoatomske rešetke

Vidi se da rešenje Šredingerove jednačine za periodični potencijal ima oblik (3.1.12) gde $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ ima period kristalne rešetke, što je sadržaj Blohove teoreme [3] a funkcija oblika (3.1.12) je poznata kao Blohova funkcija (F. Bloch, 1928). Uzimajući u obzir razmatranja (sl. 3.4.b) vidi se da elektroni u metalu ne mogu posedovati energije iz zabranjenih energija $E_g = E_b - E_a$. Sporiji elektroni sa $k_x < \pi/a$ mogu se kretati smerom x u rešetki jer im je energija manja od E_a . Brži elektroni, sa $k_x > \pi/a$, se mogu kretati u rešetki ali im energija mora biti veća za širinu zabranjenog intervala E_g .

Ta dopunska energija koju elektron mora dobiti da bi se našao u drugoj dozvoljenoj zoni troši se na savladavanje potencijala rešetke. Na taj način je uveden uticaj periodičnog potencijala rešetke na kretanje elektrona.

Energijski spektar elektrona u metalu je podeljen na intervale dozvoljenih i na intervale zabranjenih energija. Ti intervali čine zone poznate kao Briluenove zone (L. Brillouin, 1930.), a teorija koja razmatra elektronsku strukturu čvrstog stanja sa stanovišta dozvoljenih i zabranjenih zona zove se zonska teorija čvrstog stanja. Ako se, radi jednostavnosti, posmatra dvodimensijska kvadratna rešetka konstante a . Briluenova zona tako zamišljene rešetke je kvadrat (u \mathbf{k} - prostoru) stranice $2\pi/a$ (sl. 3.6). Vektor \mathbf{k} može imati sve kvantovane vrednosti u tom kvadratu. Elektroni čiji talasni vektor \mathbf{k} dodiruje stranicu kvadrata bivaju reflektovani (zadovoljen je Bragov uslov) i oni se ne mogu kretati tom rešetkom. Za trodimenzionu rešetku Briluenova zona je poliedar u \mathbf{k} - prostoru svojstven tipu kristalne rešetke, a ne vrsti metala

ili legure. Ekvienergijske konture za trodimenzionu rešetku su površi, za male energije to su sferne površi a takvog oblika je i površ koja odgovara Fermijevoj energiji. Popunjene zone, često, imaju Fermijevu površ vrlo neobičnog oblika a određivanje Fermijeve površi metala ili legure je poseban eksperimentalni zadatak.



Sl. 3.6: a) Ograničenja vrednosti talasnog vektora
 b) Konture jednake kinetičke energije
 c) Nepopunjena zona, poslednja kontura odgovara Fermijevoj energiji ϵ_F

Prema zonskoj teoriji čvrstog stanja provodnici poseduju elektronima nepopunjene dozvoljene zone ili im se prekrivaju dozvoljene zone. U oba slučaja elektroni imaju na raspolaganju nepopunjene više energetske nivoe na koje mogu preći kada im se električnim poljem poveća brzina. Izolatori, prema ovoj teoriji, imaju elektronima potpuno popunjenu zonu na koju se nastavlja zabranjena zona velike širine (nekoliko eV). Ni jaka električna polja nisu u stanju da elektron prebače u dozvoljenu zonu a prilikom zagrevanja izolator se pre razori, nego što elektroni dobiju energiju potrebnu za prelaz u narednu dozvoljenu zonu. Poluprovodnici, za razliku od izolatora, imaju zabranjenu zonu male širine (približno 1eV). Toplotna energija je u stanju da elektrone prebaci u susednu dozvoljenu zonu i provodnost se povećava sa porastom temperature, što je i karakteristično za poluprovodnike.

3.2 Elekroni u slojevitim strukturama

Da bi se napisao hamiltonijan nosilaca nanelektrisanja u strukturi sa narušenom translacionom simetrijom najpogodnije je napisati prvo hamiltonijan sistema elektrona u idealnoj beskonačnoj strukturi, a on ima oblik [2]:

$$H_{id} = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} C_{\mathbf{k}}^+ C_{\mathbf{k}} \quad (3.2.1)$$

gde je m^* -efektna masa elektrona, a $C_{\mathbf{k}}^+$ i $C_{\mathbf{k}}$ su fermi-operatori kreacije i anihilacije elektrona sa impulsom $\hbar\mathbf{k}$ i energijom $\hbar^2 k^2 / (2m^*)^{1/2}$.

Ako predemo u konfiguracioni prostor pomoću transformacija:

$$C_{\mathbf{k}} = (ND)^{-1/2} \sum_n C_n e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n}} ; \quad C_{\mathbf{k}}^+ = (ND)^{-1/2} \sum_n C_n^+ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n}} \quad (3.2.2)$$

gde je N -broj molekula u strukturi. Ako (3.2.2) uvrstimo u (3.2.1), dobijamo:

$$H_{id} = \lambda \sum_n C_n^+ C_n - \sum_{nm} w_{nm} C_n^+ C_m \quad (3.2.3)$$

gde su:

$$\lambda = (ND)^{-1} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} ; \quad w_{nm} = -(ND)^{-1/2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{n}-\mathbf{m})}. \quad (3.2.4)$$

Zbog kanoničnosti transformacije (3.2.2) operatori C_n^+ i C_n su takođe fermi-operatori, tj. važe relacije:

$$\{C_n, C_m^+\} = \delta_{nm} ; \quad \{C_n, C_m\} = \{C_n^+, C_m^+\} = 0 ; \quad C_n^2 = C_n^{+2} = 0 \quad (3.2.5)$$

Posmatraćemo generalisani kubnu strukturu sa jakom anizotropijom duž z -pravca, što znači da je konstanta rešetke u ovom pravcu (a_z) nekoliko puta veća od konstanti rešetke u pravcima x i y koje ćemo označiti sa a_x i a_y . Pretpostavićemo da se translaciona simetrija održava u XY-ravnima dok do narušenja simetrije dolazi duž z -pravca. Prilikom dopinga ovakvih struktura (ubacivanjem stranih atoma) spaterovani atomi će se locirati duž z -pravca, jer im je to energetski najpogodnije. Takođe ćemo pretpostaviti da je posmatrana struktura film (ne obavezno tanak), a to znači da se komponente vektora rešetke $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)$ menjaju na sledeći način:

$$n_x \in \begin{cases} \left[-\frac{N_x}{2} + 1, \frac{N_x}{2} \right], & N_x - \text{parno} \\ \left[-\frac{N_x-1}{2}, \frac{N_x-1}{2} \right], & N_x - \text{neparno} \end{cases}; \quad n_y \in \begin{cases} \left[-\frac{N_y}{2} + 1, \frac{N_y}{2} \right], & N_y - \text{parno} \\ \left[-\frac{N_y-1}{2}, \frac{N_y-1}{2} \right], & N_y - \text{neparno} \end{cases};$$

$$n_z \in [0, N_z] \quad (3.2.6)$$

Brojevi atoma N_x i N_y duž pravaca x i y , respektivno, mogu biti neograničeno veliki, usled čega se i održava translaciona simetrija duž ovih pravaca. Broj atoma duž z -pravca (N_z) je ograničen. Opisani model, tj. matrica sa jakom antizotropijom duž z -pravca, koja se obavezno dopinguje stranim atomima, mogao bi da posluži da se izvuku izvesni kvalitativni zaključci o ponašanju SP keramika. Poznato je da su keramički oksidi anizotropni duž z -pravca i da se superprovodno stanje realizuje putem dopinga. Razlika je u tome što se stvarna struktura keramičkih oksida aproksimira kubnom strukturu. U modelu je dalje pretpostavljeno da je spaterovanje simetrično na obema graničnim površinama: $n_z = 0$ i $n_z = N_z$ i da se između slojeva $n_z = 0$ i $n_z = 1$, kao i između slojeva $n_z = N_z - 1$ i $n_z = N_z$ smešta n_o stranih čestica, tako da je u okolini sredine filma struktura matrice koja se dopinguje ostala nepromenjena.

Ako se pretpostavi da se ponašanje veličina (3.2.4) može efektivno izraziti zakonom:

$$W_{nm} = \frac{W_o}{|n-m|^h}; \quad W_o > 0; \quad h > 0, \quad (3.2.7)$$

tada je u aproksimaciji najbližih suseda:

$$W_{n_x n_y n_z; n_x \pm 1, n_y, n_z} \equiv W_x = \frac{W_o}{a_x^h}, \quad (3.2.8)$$

$$W_{n_x n_y n_z; n_x, n_y \pm 1, n_z} \equiv W_y = \frac{W_o}{a_y^h}, \quad (3.2.9)$$

$$W_{n_x n_y n_z; n_x, n_y, n_z \pm 1} \equiv W_z = \frac{W_o}{a_z^h}. \quad (3.2.10)$$

Na osnovu izložene slike dopingovanja, očigledno je da konstanta rešetke a_z u dopingovanoj strukturi postaje zavisna od položaja

n_z , tj. $a_z \rightarrow a_{z; n_z}$. Zbog simetrije na granicama može se uzeti da je:

$$a_{z; n_z} = \alpha + \beta \left(n_z - \frac{N_z}{2} \right)^2; \quad a_{z; 0} = a_{z; N_z} = \frac{a_z}{n_0 + 1}; \quad a_{z; N_z/2} = a_z \quad (3.2.11)$$

pa sledi: $\alpha = a_z$ i $\beta = -\frac{4}{N_z^2} \frac{n_0}{n_0 + 1} a_z$,

odnosno:

$$a_{z; n_z} = a_z \left[1 - \frac{n_0}{n_0 + 1} \frac{4}{N_z^2} \left(n_z - \frac{N_z}{2} \right)^2 \right] \quad (3.2.12)$$

Zavisnost konstante rešetke od indeksa n_z povlači za sobom zavisnost interakcije duž z-pravaca od indeksa n_z , tj.:

$$\begin{aligned} W_z \rightarrow W_{z; n_z} &= \frac{W_0}{a_{z; n_z}^h} = \frac{W_0}{a_z^h} \left[1 - \frac{n_0}{n_0 + 1} \frac{4}{N_z^2} \left(n_z - \frac{N_z}{2} \right)^2 \right]^{-h} \approx \\ &\approx \left[1 + \frac{n_0}{n_0 + 1} \frac{4h}{N_z^2} \left(n_z - \frac{N_z}{2} \right)^2 \right], \end{aligned}$$

što se može napisati kao:

$$W_{z; n_z} = W_z \left[1 + \frac{4\phi}{N_z^2} \left(n_z - \frac{N_z}{2} \right)^2 \right], \quad (3.2.13)$$

pri čemu je:

$$\phi = \frac{hn_0}{n_0 + 1}. \quad (3.2.14)$$

Interakcije W_x i W_y , na osnovu opisane slike, ostaju nepromenjene. Treba napomenuti da izrazi (3.2.11)-(3.2.14) važe za N_z parno. Ali pri dovoljno velikom $N_z \approx N_z + 1$ ili pri prelazu sa n_z na kontinualnu varijablu z , odstupanja od formula (3.2.11)-(3.2.14) pri N_z neparnom, postaju nebitna. Veličine λ , prema (3.2.4), ne zavise od indeksa čvora pa se one usled dopinga ne menjaju. Na osnovu izloženog hamiltonijan dopingovane strukture možemo napisati u obliku:

$$H = H_B + H_V \quad (3.2.15)$$

gde je:

$$\begin{aligned} H_B &= \sum_{n_x n_y} \left\{ C_{n_x n_y 0}^+ \left[\lambda C_{n_x n_y 0}^- W_x \left(C_{n_x+1, n_y 0}^+ C_{n_x-1, n_y 0}^- \right) - W_y \left(C_{n_x n_y+1, 0}^+ \right. \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \left. + C_{n_x n_y-1, 0}^- \right) - W_z (1-\phi) C_{n_x n_y 1}^- \right] + C_{n_x n_y N_z}^+ \left[\lambda C_{n_x n_y N_z}^- W_x \left(C_{n_x+1, n_y N_z}^+ \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + C_{n_x-1, n_y N_z}^- \right) - W_y \left(C_{n_x n_y+1, N_z}^+ \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + C_{n_x n_y-1, N_z}^- \right) - W_z (1-\phi) C_{n_x n_y N_z-1}^- \right] \right\} \quad (3.2.16) \end{aligned}$$

i, kao što se vidi, odnosi se na granične slojeve $n_z=0$ i $n_z=N_z$, gde je očigledno:

$$W_{n_x n_y 0; n_x n_y, -1} = W_{n_x n_y N_z; n_x n_y N_z + 1} = 0, \quad (3.2.17)$$

a H_V je dato sa:

$$\begin{aligned} H_V &= \sum_{n_x n_y} \sum_{n_z=0}^{N_z-1} \left\{ C_{n_x n_y n_z}^* \left[\lambda C_{n_x n_y n_z} - W \left(C_{n_x+1, n_y, n_z} + C_{n_x-1, n_y, n_z} \right) \right] - \right. \\ &- W_y \left(C_{n_x, n_y+1, n_z} + C_{n_x, n_y-1, n_z} \right) - W_z \left[1 + \frac{4\phi}{N_z^2} \left(n_z - \frac{N_z}{2} \right)^2 \right] \cdot \\ &\cdot \left. \left(C_{n_x, n_y, n_z+1} + C_{n_x, n_y, n_z-1} \right) \right\}. \end{aligned} \quad (3.2.18)$$

Analizu sistema sa hamiltonijanom (3.2.15) izvršitćemo pomoću jednoelektronske funkcije stanja:

$$|\Psi\rangle = \sum_{n_x n_y n_z} A_{n_x n_y n_z} C_{n_x n_y n_z}^* |0\rangle \quad (3.2.19)$$

iz uslova normiranja: $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$, na osnovu (3.2.19) sledi:

$$\sum_{n_x n_y n_z} |A_{n_x n_y n_z}|^2 = 1. \quad (3.2.20)$$

Jednačine za određivanje koeficijenta $A_{n_x n_y n_z}$ dobijamo na osnovu jednačina kretanja za operatore $C_{n_x n_y n_z}$:

$$i\hbar \frac{d}{dt} C_{n_x n_y n_z} = [C_{n_x n_y n_z}, H]. \quad (3.2.21)$$

Pošto je $C_{n_x n_y n_z}(t) = C_{n_x n_y n_z}(0)e^{-i\omega t}$, $\omega = E/\hbar$ sledi:

$$i\hbar \frac{d}{dt} C_{n_x n_y n_z} = EC_{n_x n_y n_z} \quad (3.2.22)$$

pa jednačine kretanja možemo napisati u obliku:

$$E C_{n_x n_y n_z} - [C_{n_x n_y n_z}, H] \equiv O_{n_x n_y n_z}; \quad O_{n_x n_y n_z} = 0. \quad (3.2.23)$$

Ako na osnovu (3.2.15, 16, 18 i 23) formiramo operatore $O_{n_x n_y 0}$, $O_{n_x n_y N_z}$ i $O_{n_x n_y n_z}$ i primenimo ih na funkciju (3.2.18) dobijamo sistem jednačina:

$$\begin{aligned}
 & O_{n_x n_y}^0 \quad |\Psi\rangle = 0 \quad ; \quad n_z = 0 \\
 & O_{n_x n_y N_z}^0 \quad |\Psi\rangle = 0 \quad ; \quad n_z = N_z \\
 & O_{n_x n_y n_z}^0 \quad |\Psi\rangle = 0 \quad ; \quad 1 \leq n_z \leq N_z - 1
 \end{aligned} \tag{3.2.24}$$

Pri čemu se uzimaju u obzir relacije (3.2.5) kao i relacija:

$$C_{n_x n_z n_y} C_{m_x m_y m_z}^* |0\rangle = \delta_{n_x m_x} \delta_{n_y m_y} \delta_{n_z m_z} |0\rangle. \tag{3.2.25}$$

Posle smene:

$$A_{n_x n_y n_z} = A_{n_z} e^{i(n_x \alpha_x k_x + n_y \alpha_y k_y)} \tag{3.2.26}$$

gde je $k_x = \frac{2\pi}{N_x \alpha_x} \nu_x$ i $k_y = \frac{2\pi}{N_y \alpha_y} \nu_y$, a:

$$\begin{aligned}
 \nu_x \in & \left\{ \begin{array}{l} \left(-\frac{N_x}{2} + 1, \frac{N_x}{2} \right); N_x - \text{parno} \\ \left(-\frac{N_x - 1}{2}, \frac{N_x - 1}{2} \right); N_x - \text{neparno} \end{array} \right. \\
 \nu_y \in & \left\{ \begin{array}{l} \left(-\frac{N_y}{2} + 1, \frac{N_y}{2} \right); N_y - \text{parno} \\ \left(-\frac{N_y - 1}{2}, \frac{N_y - 1}{2} \right); N_y - \text{neparno} \end{array} \right.
 \end{aligned} \tag{3.2.27}$$

i na osnovu činjenice da je:

$$\lambda = 2W_x + 2W_y + 2W_z \tag{3.2.28}$$

dobija se sledeći sistem diferencijalnih jednačina:

$$\left[E - 4Q_{k_x k_y} - 2W_z \right] A_{\phi} + W_z (1-\phi) A_0 = 0; \text{ za } n_z = 0, \tag{3.2.29}$$

$$\left[E - 4Q_{k_x k_y} - 2W_z \right] A_{N_z - 1} + W_z (1-\phi) A_{N_z} = 0; \text{ za } n_z = N_z, \tag{3.2.30}$$

$$\begin{aligned}
 \left[E - 4Q_{k_x k_y} - 2W_z \right] A_{n_z} + W_z \left[1 + \frac{4\phi}{N_z^2} \left(n_z - \frac{N_z}{2} \right)^2 \right] \left[A_{n_z + 1} + A_{n_z - 1} \right] = 0, \\
 \text{za } 1 \leq n_z \leq N_z - 1
 \end{aligned} \tag{3.2.31}$$

gde je:

$$Q_{k_x k_y} \equiv Q = W_x \sin^2 \frac{\alpha_x k_x}{2} + W_y \sin^2 \frac{\alpha_y k_y}{2} \tag{3.2.32}$$

Dalja analiza problema će se vršiti u kontinualnoj aproksimaciji da bi se izbegle teškoće koje se javljaju prilikom određivanja koeficijenta A_n iz sistema diferencijalnih jednačina (3.2.29-31). Problem ćemo rešavati prerelaskom na kontinualnu varijablu z , t.j.

$$n_z \rightarrow z/a_z; \quad N_z \rightarrow L/a_z; \quad a_z; n_z \rightarrow a_z(z) \tag{3.2.33}$$

tada izrazi (3.2.12) trpe sledeće transformacije:

$$a_{z_n} \rightarrow a_z(z) = a_z \left[1 - \frac{4}{L^2} \frac{n_o}{n_o+1} (z - \frac{L}{2})^2 \right], \quad (3.2.34)$$

$$W_{z; n_z} \rightarrow W_z(z) = W_z \left[1 + \frac{4\phi}{L^2} (z - \frac{L}{2})^2 \right]. \quad (3.2.35)$$

Koeficijenti A_{n_z} transformišu se na sledeći način

$$A_{n_z} \rightarrow A(z) \quad (3.2.36)$$

$$\text{dok je: } A_{n_z+1} + A_{n_z-1} \rightarrow A(z+\bar{a}_z) + A(z-\bar{a}_z)$$

Ako dalje iskoristimo aproksimaciju:

$$A(z \pm \bar{a}_z) \approx A(z) \pm \bar{a}_z \frac{dA}{dz} + \frac{1}{2} \bar{a}_z^2 \frac{d^2 A}{dz^2}$$

na osnovu nje dobijamo:

$$A(z+\bar{a}_z) + A(z-\bar{a}_z) = 2A(z) + \bar{a}_z^2 \frac{d^2 A}{dz^2} \quad (3.2.37)$$

gde je:

$$\begin{aligned} \bar{a}_z &= \bar{a}_z(z) = L^{-1} \int_0^L dz a_z(z) = -\frac{\bar{a}_z}{L} \int_0^L dz \left[1 - \frac{4}{L^2} \frac{n_o}{n_o+1} (z - \frac{L}{2})^2 \right] \\ \bar{a}_z &= a_z \frac{2n_o + 3}{3(n_o + 1)} \end{aligned} \quad (3.2.38)$$

Važna posledica prelaska u kontinuum je činjenica da se pri prelazu $n_z \rightarrow z$ gube iz računa jednačine (3.2.29-30) tj. one se sливaju u jednačinu (3.2.31) koja napisana u kontinualnoj aproksimaciji glasi:

$$(E - 4Q - 2W_x) A(z) + W_z \left[1 + \frac{4\phi}{L^2} (z - \frac{L}{2})^2 \right] \left[2A(z) + \bar{a}_z^2 \frac{d^2 A}{dz^2} \right] = 0. \quad (3.2.39)$$

Posle aproksimacije:

$$\left\{ W_z \left[1 + \frac{4\phi}{L^2} (z - \frac{L}{2})^2 \right] \right\}^{-1} \approx W_z^{-1} \left[1 - \frac{4\phi}{L^2} (z - \frac{L}{2})^2 \right], \quad (3.2.40)$$

jednačina (3.2.39) postaje:

$$\frac{d^2 A}{dz^2} + \left[\frac{E - 4Q}{\bar{a}_z^2 W_z} - \frac{4\phi(E - 4Q - 2W_z)}{\bar{a}_z^2 L^2 W_z} (z - \frac{L}{2})^2 \right] A = 0 ; \quad z \in [0, L] \quad (3.2.41)$$

Ova jednačina će se rešavati uz pretpostavku da je:

$$E > 4Q + 2W_z. \quad (3.2.42)$$

Ako uvedemo smenu:

$$z-L/2 = \tau \xi ; \quad \tau = \text{const.} \quad (3.2.43)$$

onda je: $\frac{d^2 A}{dz^2} = \tau^{-2} \frac{d^2 A}{d\xi^2}$ i jednačina (3.2.41) postaje:

$$\frac{d^2 A}{d\xi^2} + \left[\frac{E-4Q}{\bar{a}_z^2 W_z} \tau^2 - \frac{4\phi(E-4Q-2W_z)}{\bar{a}_z^2 L^2 W_z} \tau^4 \xi^2 \right] A = 0. \quad (3.2.44)$$

Konstantu τ odredimo iz uslova

$$\frac{4\phi(E-4Q-2W_z)}{\bar{a}_z^2 L^2 W_z} \tau^4 = 1 \quad (3.2.45)$$

odakle sledi:

$$\tau = \left(\frac{\bar{a}_z L}{2} \right)^{1/2} \left(\frac{W_z}{\phi(E-4Q-2W_z)} \right)^{1/4} \quad (3.2.46)$$

i jednačina (3.2.44) postaje poznata Ermit-Veberova jednačina:

$$\frac{d^2 A}{d\xi^2} + (P-\xi^2)A = 0 ; \quad \xi \in \left[-\frac{L}{2\tau}, \frac{L}{2\tau} \right], \quad (3.2.47)$$

gde je:

$$P = \frac{1}{2} \cdot \frac{L}{\bar{a}_z} - \frac{E-4Q}{\left[\phi W_z (E-4Q-2W_z) \right]^{1/2}} \quad (3.2.48)$$

Na ovom mestu se uvodi zahtev da amplitude A budu konačne pri proizvoljnoj debljini L modelne strukture (znači i pri $L \rightarrow \infty$). Da bismo udovoljili ovom zahtevu moramo uzeti poznati uslov za konačnost rešenja Ermit-Veberove jednačine u beskonačnosti:

$$P = 2\mu+1 ; \quad \mu=0,1,2, \dots \quad (3.2.49)$$

Na osnovu (3.2.48-49) sledi:

$$E_{1,2} = 4Q+2b^2(2\mu+1)^2\phi W_z \left\{ 1 \pm \sqrt{ \frac{2}{(2\mu+1)^2 b^2 \phi} } \right\}^{1/2} \quad (3.2.50)$$

gde je:

$$b = \frac{\bar{a}_z}{L} = \frac{2n_o+3}{3(n_o+1)} - \frac{\bar{a}_z}{L} = \frac{2n_o+3}{3(n_o+1)} N_z^{-1} \quad (3.2.51)$$

Iz izraza za energiju vidi se da indeks μ mora biti ograničen sa donjem kraju. Da bi energije bile realne mora biti ispunjeno: $2(2\mu+1)^{-2}b^{-2}\phi^{-1} \leq 1$ a to nameće ograničenje za μ :

$$\mu \geq \frac{1}{2} \left[b^{-1} \left(\frac{2}{\phi} \right)^{1/2} - 1 \right] = \frac{1}{2} \left[\frac{3(n_o+1)}{-2n_o+3} N_z \left(\frac{2(n_o+1)}{hn_o} \right)^{1/2} - 1 \right] \quad (3.2.52)$$

Znači, najniža dozvoljena vrednost indeksa μ je najmanji prirodni broj koji je veći od poslednjeg člana u (3.2.52). Kao što se vidi donja granica kvadratnog broja μ zavisi od broja slojeva strukture (preko N_z), od načina spaterovanja (preko n_0) i od tipa ion-jon interakcije (preko b). Što je struktura deblja to je donja vrednost indeksa μ veća.

Da bi se uprostila dalja analiza, umesto izraza (3.2.50) za energije, biće korišćeni približni izrazi koji se dobijaju aproksimativnim razvojem kvadratnog korena u red: $(1-x)^{1/2} \approx 1 - (1/2)x - (1/8)x^2$ onda su približni izrazi za energije sledeći:

$$E_1 = 4Q - 2W_z + 4b^2 (2\mu+1)^2 \phi W_z - \frac{1}{2(2\mu+1)^2 b^2 \phi} W_z \quad (3.2.53)$$

$$E_2 = 4Q - 2W_z + \frac{W_z}{2(2\mu+1)^2 b^2 \phi} \quad (3.2.54)$$

Oba dobijena izraza za energiju zadovoljavaju neophodan uslov tj.

$$E_{1,2} - 4Q - 2W_z > 0 \quad (3.2.55)$$

U daljnjim analizama ograničićemo se na izraz E_2 iz sledećih razloga.

- a) Pošto je $E_2 < E_1$, stanja sa energijom E_2 su stabilnija i bolje naseljena pa ona određuju na bitan način ponašanje sistema.
- b) Iz izraza (3.2.54) i (3.2.52) vidi se da kada raste debljina filma (raste N_z) onda raste i donja granica za indeks μ , a popravka u E_2 koja zavisi od spaterovanja opada. Ovo je u punom skladu sa zaključcima koji se mogu izvesti bez prelaska na kontinum, tj. pri analizi diskretnih jednačina (3.2.29-31). Za dati izbor energija, dat izrazom (3.2.54), je na osnovu (3.2.45):

$$\tau = 2^{-1/4} L b (2\mu+1)^{1/2} \quad (3.2.56)$$

tada se, s obzirom na (3.2.47), ξ menja u granicama:

$$\xi \in \left[-\frac{1}{2^{3/4} (2\mu+1)^{1/2} b}, \frac{1}{2^{3/4} (2\mu+1)^{1/2} b} \right] \quad (3.2.57)$$

a koristeći vezu (3.2.43) sledi: $z = \frac{L}{2} + 2^{-1/4} L b (2\mu+1)^{1/2} \xi$

i s obzirom da je $L b = \bar{a}_z = \frac{2n_0 + 3}{3(n_0 + 1)} a_z$, tada je:

$$z = \frac{L}{2} + \frac{2n_0 + 3}{3(n_0 + 1)} \left[\frac{2\mu+1}{2^{1/2}} \right]^{1/2} a_z \xi \quad (3.2.58)$$

Iz (3.2.57) se vidi da su granice intervala za ξ proporcionalne $L/a_z = b^{-1}$ pa se može uzeti približno:

$$\xi \in [-\infty, \infty], \quad (3.2.59)$$

pri čemu je ova aproksimacija bolja, ukoliko je film deblji. Tada se rešenje jednačine (3.2.47) može napisati u obliku:

$$A_\mu(\xi) \equiv \Psi_\mu(\xi) = \frac{e^{-(1/2)\xi^2}}{\left[2^\mu \mu! \sqrt{\pi}\right]^{1/2}} H_\mu(\xi); \quad H_\mu(\xi) = (-1)^\mu e^{\xi^2} \frac{d^\mu}{d\xi^\mu} (e^{-\xi^2}). \quad (3.2.60)$$

Ova rešenja su ortonormirana uslovom:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi A_\mu(\xi) A_{\mu'}(\xi) = \delta_{\mu\mu'}. \quad (3.2.61)$$

Pošto smo izvršili prelaz $n_z \rightarrow z \rightarrow \tau\xi$, очigledno je da:

$$\sum_{n_x n_y n_z} \rightarrow \frac{\tau}{a_z} \sum_{n_x n_y} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \quad (3.2.62)$$

Ako se operacija (3.2.62) izvrši u uslovu normiranja (3.2.20) i uzimajući da:

$$A_{n_x n_y n_z} \rightarrow N_{k_x k_y \mu} e^{i(n_x a_x k_x + n_y a_y k_y)} A_\mu(\xi) \quad (3.2.63)$$

gde je $N_{k_x k_y \mu}$ realni normirajući množitelj, onda imamo:

$$\frac{\tau}{a_z} N_{k_x k_y \mu} N_{x y} = 1; \quad N_{k_x k_y \mu} \equiv N_\mu = \frac{\xi^{1/2}}{\left[N_x N_y (2\mu+1)^{1/2}\right]^{1/2}}. \quad (3.2.64)$$

Jednočestična talasna funkcija ima oblik:

$$|\Psi\rangle_{k_x k_y \mu} = \left(-\frac{2\mu+1}{2}\right)^{1/2} \sum_{n_x n_y} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi A_{n_x n_y}^{k_x k_y} (\mu; \xi) C_{n_x n_y}^+ (\xi) |0\rangle, \quad (3.2.65)$$

gde su koeficijenti $A_{n_x n_y}^{k_x k_y} (\mu; \xi)$ dati izrazom:

$$A_{n_x n_y}^{k_x k_y} (\mu; \xi) = \frac{2^{1/2}}{\left[N_x N_y (2\mu+1)^{1/2}\right]^{1/2}} e^{i(n_x a_x k_x + n_y a_y k_y)} A_\mu(\xi) \quad (3.2.66)$$

Koeficijenti $A_{n_x n_y}^{k_x k_y} (\mu; \xi)$ su ortonormirani, tj. važi uslov:

$$\frac{\tau}{a_z} \sum_{n_x n_y} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi A_{n_x n_y}^{k_x k_y} A_{n_x n_y}^{k_x k_y} (\mu; \xi) = \delta_{k_x q_x} \delta_{k_y q_y} \delta_{\mu\nu}; \quad \frac{\tau}{a_z} = \left(\frac{2\mu+1}{2}\right)^{1/2} \quad (3.2.67)$$

Dijagonalizaciju elektronskog hamiltonijana izvršićemo po sledećim etapama.

1. U okviru kontinualne aproksimacije hamiltonijan H_B se "sliva" u hamiltonijan H_V korišćenjem formula prelaza na kontinuum:

$$\sum_{n_z=1}^{N_z-1} \rightarrow a^{-1} \int_0^L dz \rightarrow \frac{\tau \mu}{\bar{a}_z} \frac{\omega}{-\omega} d\xi ; \quad C_{n_x n_y n_z} \rightarrow C_{n_x n_z}(\xi)$$

$$W_z \left[1 + \frac{4\phi}{N_z^2} (n_z - \frac{N_z}{2})^2 \right] \rightarrow W_z \left[1 + \frac{4\phi}{L^2} (z - \frac{L}{2})^2 \right] \rightarrow W_z \left[1 + \frac{4\phi \tau \mu}{L^2} \xi^2 \right]$$

$$C_{n_x n_y n_z+1} + C_{n_x n_y n_z-1} \rightarrow 2 C_{n_x n_y}(\xi) + \frac{\bar{a}_z^2}{\tau \mu^2} \frac{d^2 C_{n_x n_y}(\xi)}{d\xi^2}$$

2. Od operatora $C_{n_x n_y}(\xi)$ prelazimo na nove operatore $C_{k_x k_y \mu}$ putem transformacije:

$$C_{n_x n_y}(\xi) = \sum_{k_x k_y \mu} A_{n_x n_y}^{k_x k_y}(\mu; \xi) C_{k_x k_y \mu}. \quad (3.2.68)$$

Da bi smo pokazali da je ova transformacija kanonička, potražićemo inverznu transformaciju od (3.2.68). Ona se nalazi tako što se (3.2.68) pomnoži sa $A_{n_x n_y}^{k_x k_y}(\nu; \xi)$, sumira po n_x i n_y i integrali po ξ , zatim iskoristi uslov ortonormiranosti (3.3.67), što sve daje:

$$C_{k_x k_y \mu} = \left(\frac{2\mu+1}{2^{1/2}} \right)^{1/2} \sum_{n_x n_y} \frac{\omega}{-\omega} \int d\xi A_{n_x n_y}^{k_x k_y}(\mu; \xi) C_{n_x n_y}(\xi) \quad (3.2.69)$$

S obzirom da su komutacione relacije za operatore u diskretnoj reprezentaciji date sa:

$$\{C_{n_x n_y n_z}, C_{m_x m_y m_z}^+\} = \delta_{n_x m_x} \delta_{n_y m_y} \delta_{n_z m_z} \quad (3.2.70)$$

i ako predemo na kontinualnu varijablu $n_z \rightarrow z$ i $m_z \rightarrow y$, a zatim sa z na $\tau\xi$ i sa y na $\tau\eta$, onda je:

$$\delta_{n_z m_z} = \bar{a}_z \delta(z-y) = \bar{a}_z \delta[\tau(\xi-\eta)] = \frac{\bar{a}_z}{\tau} \delta(\xi-\eta) \quad (3.2.71)$$

relacija (3.2.70) u kontinumu će imati oblik:

$$\{C_{n_x n_z}(\xi), C_{m_x m_y}^+(\eta)\} = \frac{\bar{a}_z}{\tau} \delta_{n_x m_x} \delta_{n_y m_y} \delta(\xi-\eta) = \left(\frac{\bar{a}_z^{1/2}}{2\mu+1} \right)^{1/2} \delta_{n_x m_x} \delta_{n_y m_y} \quad (3.2.72)$$

Na osnovu (3.2.68) može se pisati:

$$C_{q_x q_y \nu}^+ = \left(\frac{2\nu+1}{2^{1/2}} \right)^{1/2} \sum_{m_x m_y=-\infty}^{\infty} \int d\eta A_{m_x m_y}^{q_x q_y}(\nu; \eta) C_{m_x m_y}^+(\eta) \quad (3.2.73)$$

Ako se obrazuje antikomutator operatora $C_{k_x k_y \mu}^- i C_{q_x q_y \nu}^+$, i iskoristi (3.2.67), dobija se:

$$\{C_{k_x k_y \mu}^-, C_{q_x q_y \nu}^+\} = \delta_{k_x q_x} \delta_{k_y q_y} \delta_{\mu \nu}. \quad (3.2.74)$$

Ovim je dokazano da su $C_{k_x k_y \mu}^- i C_{q_x q_y \nu}^+$ Fermi operatori, a time i kanoničnost transformacije (3.2.68).

Tada se hamiltonijan H_v u kontinualnoj aproksimaciji može napisati u obliku:

$$H_v \rightarrow H = \frac{\tau}{a_z} \sum_{n_x n_y=-\infty}^{\infty} \int d\xi C_{n_x n_y}^+(\xi) \left\{ \lambda C_{n_x n_y}(\xi) - W_x [C_{n_x+1, n_y}(\xi) + C_{n_x-1, n_y}(\xi)] - W_y [C_{n_x, n_y+1}(\xi) + C_{n_x, n_y-1}(\xi)] - W_z \left[1 + \frac{4\phi\tau^2}{L^2} \xi^2 \right] \left[2C_{n_x n_y}(\xi) + \frac{a_z^2}{\tau^2} \frac{d^2 C_{n_x n_y}(\xi)}{d\xi^2} \right] \right\}. \quad (3.2.75)$$

Sada se pristupa dijagonalizaciji hamiltonijana. Posle zamene (3.2.68) u (3.2.75) imamo:

$$H = \frac{\tau}{a_z} \sum_{\substack{k_x k_y \mu \\ q_x q_y \nu}} C_{q_x q_y \nu}^+ C_{k_x k_y \mu}^- \sum_{n_x n_y=-\infty}^{\infty} \int d\xi A_{n_x n_y}^{q_x q_y}(\nu; \xi) \left\{ \lambda A_{n_x n_y}^{k_x k_y}(\mu; \xi) - 2W_x [A_{n_x+1, n_y}^{k_x k_y}(\mu; \xi) + A_{n_x-1, n_y}^{k_x k_y}(\mu; \xi)] - 2W_y [A_{n_x, n_y+1}^{k_x k_y}(\mu; \xi) + A_{n_x, n_y-1}^{k_x k_y}(\mu; \xi)] - 2W_z \left[1 + \frac{4\phi\tau^2}{L^2} \xi^2 \right] \left[2A_{n_x n_y}^{k_x k_y}(\mu; \xi) + \frac{a_z^2}{\tau^2} \frac{d^2 A_{n_x n_y}^{k_x k_y}(\mu; \xi)}{d\xi^2} \right] \right\} \quad (3.2.76)$$

Na osnovu (3.2.66) može se napisati:

$$A_{n_x+1, n_y}^{k_x k_y}(\mu; \xi) + A_{n_x-1, n_y}^{k_x k_y}(\mu; \xi) = 2 \cos \alpha_x k_x A_{n_x n_y}^{k_x k_y}(\mu; \xi) \quad (3.2.77)$$

$$A_{n_x, n_y+1}^{k_x k_y}(\mu; \xi) + A_{n_x, n_y-1}^{k_x k_y}(\mu; \xi) = 2 \cos \alpha_y k_y A_{n_x n_y}^{k_x k_y}(\mu; \xi)$$

Ako se u jednačini (3.2.39) veličina E zameni sa $E_{k_x k_y \mu}$ i sa promenljive z pređe na promenljivu ξ , na osnovu smene (3.2.43), dobija se:

$$W_z (1 + \frac{4\phi\tau^2}{L^2} \xi^2) \left[2A_\mu(\xi) + \frac{\bar{a}_z^2}{\tau^2} - \frac{d^2 A_\mu(\xi)}{d\xi^2} \right] = (2W_z + 4Q - E_{k_x k_y \mu}) A_\mu(\xi)$$

Što se posle množenja sa $2^{1/8} (N_x N_y)^{-1/2} (2\mu+1)^{-1/2}$ svodi na:

$$\begin{aligned} W_z (1 + \frac{4\phi\tau^2}{L^2} \xi^2) \left[2 A_{n_x n_y}^{k_x k_y} (\mu; \xi) + \frac{\bar{a}_z^2}{\tau^2} - \frac{d^2 A_{n_x n_y}^{k_x k_y} (\mu; \xi)}{d\xi^2} \right] &= \\ &= (2W_z + 4Q - E_{k_x k_y \mu}) A_{n_x n_y}^{k_x k_y} (\mu; \xi). \end{aligned} \quad (3.2.78)$$

Na osnovu (3.2.77) i (3.2.78), uslova ortogonalnosti (3.2.67) i formule (3.2.26) izraz (3.2.76) za hamiltonijan sistema se dijagonalizuje i postaje:

$$H = \sum_{k_x k_y \mu} E_{k_x k_y \mu} C_{k_x k_y \mu}^* C_{k_x k_y \mu}. \quad (3.2.79)$$

Izraz (3.2.79) predstavlja ovde nadeni hamiltonijan elektronskog podsistema. On omogućuje nastavak započetih istraživanja mehanizma superprovodenja kod visokotemperaturnih oksidnih keramika zajedno sa hamiltonijanom fononskog podistema koji je naden nešto pre.

Već iz do sada sprovedenih analiza može se zaključiti da teorijski model simetrično deformisanih struktura zadovoljava osnovne eksperimentalne pokazatelje ponašanja superprovodnih perovskita. Prvenstveno se to odnosi na dokazano prisustvo gepa u spektru elementarnih ekscitacija u ovom sistemu (kako fonona, tako i elektrona) i njegovo ponašanje sa stehiometrijskim odnosom ovih struktura.

Ostaje, dakako, otvoreno pitanje interakcije između podistema elementarnih nanelektrisanja i fonona (optičkog tipa), jer tek ovaj rezultat može da da potpuniju sliku o prirodi novog superprovodnog stanja.

4. ZAKLJUČAK

Do današnjih dana mehanizam visokotemperaturske superprovodnosti nije razrešen pa zajedno sa istraživanjem fuzije predstavlja prioriteten zadatak u fizici.

Prelaz u SP stanje smatra se da je uglavnom potvrđen ako su reproducibilne dve karakteristike: odsustvo električnog otpora ($\rho=0$) i istiskivanje magnetskog polja iz uzorka (unutar uzorka $B=0$). Pored ovoga bitne karakteristike SPR su postojanje kritičnog polja (B_c), kritične temperature (T_c) i kritične gustine električne struje (J_c). Ovi kritični parametri, za sada, i ograničavaju njihovu širu primenu. Posebna odlika VTSPR je njihova granularna struktura i anizotropnost, a eksperimentalno je utvrđeno postojanje izotopskog efekta, Kuperovih parova nosilaca nanelektrisanja slično kao i kod konvencionalnih SPR, ali BCS-model nije mogao objasniti ovako visoke kritične temperature. S toga smo na osnovu dosadašnjih saznanja, uglavnom eksperimentalnih istraživanja, postavili model keramičke strukture kao generalisane kubne strukture kod koje su međuatomска rastojanja duž jednog pravca nekoliko puta veća nego u druga dva pravca. Spaterovanim atomima je energetski najpogodnije da se usade baš duž toga pravca. Analize fononskog spektra ovakvog modela su pokazivale da se u spektru pojavljuju samo optičke fononske grane koje imaju energetski gap, što znači da je za njihovo pobudivanje potrebno uložiti (toplotnu) energiju veću od njihovog energetskog gape.

Analiza elektronskog spektra u ovakvim simetrično deformisanim strukturama (u odnosu na ravni $n_z=0$ i $n_z=N_z$) su pokazala da se kao posledica postojanja granica duž z-ose u spektru nosilaca nanelektrisanja pojavljuju dve energetske grane. Niža vrednost energije odgovara bolje populisanim stanjima i sadrži član koji zavisi od spaterovanja. Ovaj član opada sa porastom debljine filma. Viša vrednost energije u spektru nosilaca nanelektrisanja nije posebno analizirana budući da su ti nivoi slabo popunjeni. Pored ovoga u posmatranom modelu su određene i jednočestične funkcije stanja ovoga sistema.

Treba reći da teorijska istraživanja u okviru prezentovanog modela ovim nisu završena. Potrebno je formirati elektron-fonon interakciju i izdvojiti samo onaj bitan deo koji opisuje formiranje Kuperovih parova nosilaca nanelektrisanja. Tek nakon toga sledi termodinamička analiza i konačni zaključci.

5. LITERATURA

- [1] P. M. Nikolić i D. I. Raković: *Elektrotehnički materijali*, Naučna knjiga, Beograd 1987.
- [2] B. S. Tošić: *Statistička fizika*, PMF, Novi Sad 1978.
- [3] C. Kittel: *Uvod u fiziku čvrstog stanja*, Savremena administracija, Beograd 1970.
- [4] I. G. Bednorz and K. A. Müller: *Perovskite-Type Oxides - the New Approach to High-Tc Superconductivity*; Nobel Lecture, Stockholm 1987.
- [5] M. Pantić: *Masena deformacija i superprovodljivost*, Diplomski rad PMF, Novi Sad 1989.
Z. Marković: *Sinteza Y-Ba-Cu-O visokotemperaturnih superprovodnih keramika i analiza mogućnosti njihove primene u superprovodnim kalemovima*, Diplomski rad, FTN Novi Sad 1989.
- [6] J. P. Šetrajčić, R. P. Djajić, D. Lj. Mirjanić and B. S. Tošić: *Phonon Spectra in Superconducting Ceramics*, Physica Scripta 42, 732 (1990).
- [7] D. Grdenić: *Molekule i kristali*, Školska knjiga, Zagreb 1985.
- [8] A.S. Davydov: *Kvantovaya mehanika*, Nauka, Moskva 1973.