

УНИВЕРЗИТЕТ У НОВОМ САДУ
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ
ИНСТИТУТ ЗА ФИЗИКУ

УНИВЕРЗИТЕТ У НОВОМ САДУ
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ

ПРИМЉЕНО:	- 7. IX 1999
ОРГАНИЗ ЈЕД.	БРОЈ
0603	141/7

mr Милоје Ђетковић

**КВАНТНЕ ЖИЦЕ
МЕТАЛНИХ И ДИЕЛЕКТРИЧНИХ МАТЕРИЈАЛА**

-Докторска дисертација-

НОВИ САД, 1999.

Овај рад је посвећен мојој деци.

У самој природи ствари је да се сваки истраживач ослања на рад својих претходника. Тако и ова теза представља резултат школе коју је развио др Братислав Тошић, редовни професор новосадског Универзитета.

Користим ову прилику да се захвалим свима онима који су ми на неки начин помогли да ову дисертацију урадим. Посебну захвалност изражавам *менитору др Братиславу Тошићу*, редовном професору ПМФ-а у Новом Саду, чија је племенистост, несебична помоћ и критичка анализа резултата била од фундаменталног значаја за завршавање овог обимног посла.

Дугујем захвалност *др Уранији Козмидис-Лубурић*, ванредном професору Факултета техничких наука, *др Јовану Шејрачићу*, редовном професору ПМФ-а, као и *др Љиљани Мајковић*, ванредном професору ПМФ-а у Новом Саду, на корисним саветима и сугестијама током израде дисертације.

Захваљујем се *др Милану Панићу*, научном сараднику Института за нуклеарне науке „Винча“, на корисним дискусијама и одличној сарадњи.

Мојој пријатељици *мр Томки Миљановић* се захваљујем што је помогла да успоставим сарадњу са Институтом за физику у Новом Саду.

Конечно, неизмерну захвалност дугујем мојој породици: супруги Борики и деци Бојани, Душану и Милици.

Прибој, 1999. године

Милоје Ђетковић

С А Д Р Ж А Ј

УВОД	4
1. ЕЛЕМЕНТАРНА ПОБУЂЕЊА У КОНДЕНЗОВАНОЈ МАТЕРИЈИ	6
1.1. Фонони.....	6
1.2. Екситони.....	13
1.3. Спински таласи.....	18
1.4. Фероелектрична побуђења.....	22
1.5. Специфична топлота електронског гаса.....	28
1.6. БЦС теорија суперпроводљивости.....	29
2. ПОСЕБНЕ КАРАКТЕРИСТИКЕ ТАНКИХ ФИЛМОВА	37
2.1. Фонони у танким филмовима.....	37
2.2. Електрон-фонон интеракција и утицај на суперкондуктивну критичну температуру.....	57
2.3. Осцилаторно понашање неких карактеристика танких филмова.....	69
3. МИКРОТЕОРИЈСКИ ПРИЛАЗ У АНАЛИЗИ КВАНТНИХ ЖИЦА	72
3.1. Досадашња истраживања квантних жица.....	72
3.2. Формирање основног система једначина.....	73
3.3. Хамилтонијани различитих физичких система.....	81
3.4. Екстремно танке квантне жице.....	84
4. КОНТИНУАЛНА АПРОКСИМАЦИЈА У ТЕОРИЈИ КВАНТНИХ ЖИЦА	88
4.1. Таласна функција квантне жице у континуалној апроксимацији.....	88
4.2. Простирање различитих типова побуђења кроз квантне жице.....	97
4.3. Резиме изведенih резултата у континуалној апроксимацији.....	101
4.4. Фонони у структурима ограниченим у све три димензије (квантне тачке)	102
ЗАКЉУЧАК	116
ЛИТЕРАТУРА	118

УВОД

Последњих година необично је повишено интересовање за структуре са нарушеном симетријом. Основни разлог за ово је по свој прилици чињеница да су идеалне структуре довољно исцрпно испитане и теоријски и експериментално и да су одређене границе неких за примену битних ефеката. Тако, на пример, Богољубов је показао [1] да се у идеалним структурама не могу добити више суперкондуктивне критичне температуре од оних које предвиђа Бардин-Купер-Шрифер теорија. Такође је констатовано да у идеалним структурама не могу да се постигну концентрације оптичких побуђења [2] које би биле веће од 10^{-3} , што другим речима значи да се и најгуашћим ласерским сноповима ексцитира тек сваки хиљадити молекул. Може се навести низ сличних примера који показују да структуре које се природно појављују имају горњу границу домета неких битних величина.

Због тога се кренуло потпуно природним путем а то је синтеза нових структура у којима би домети карактеристика идеалних структура били премашени. Под речју синтеза подразумева се широк круг интервенција почев од вештачког нарушувања симетрије до разних видова допинга.

У танким филмовима чија је техника израде последњих година веома усавршена константован је низ ефеката којих нема у идеалним структурама. Тако, на пример, за побуђивање фонона у танким филмовима потребна је извесна коначна доза енергије која је утолико већа уколико је филм тањи. Осим тога константа електрон-фонон интеракције у танким филмовима већа је од одговарајуће величине у масивним структурама, па зато филмови имају вишу суперкондуктивну критичну температуру него одговарајуће масивне структуре. У раду [3] показано је да се погодним допирањем граничних слојева молекуларних кристала могу постићи концентрације површинских екситона које су реда 0,1.

Поменуте и остале особине танких филмова које су углавном последица просторне ограничности структуре навеле су истраживаче да се усмере на истраживање квантних жица и квантних тачака при чему су квантне жице структуре ограничене у две димензије, квантне тачке структуре ограничене у све три димензије.

Прве анализе показују да квантне жице и квантне тачке поседују низ специфичних особина које би могле наћи корисну непосредну примену.

Циљ истраживања у овој дисертацији су квантне жице при чему је акценат стављен на егзактно микротеоријско формирање скупа граничних једначина. Ово је извршено за низ различитих структура као што су метали, феромагнетици, фероелектрици и молекуларни кристали.

Посебно су, када је већ формиран систем основних једначина, испитани ефекти преласка на континуум. У континуалној апроксимацији, која носи низ математичких олакшица, испитани су фонони у квантним тачкама и константовано је да се скраћивањем димензија квантне тачке [4] могу постићи активационе температуре за фононе које су реда $100K$.

Све ово што је укратко нотирано јасно показује да будућност физике кондензоване материје и пораст њених достигнућа лежи у испитивању просторно ограничених и специфично допираних структура.

1. ЕЛЕМЕНТАРНА ПОБУЂЕЊА У КОНДЕНЗОВАНОЈ МАТЕРИЈИ

1.1. Фонони

Приликом квантномеханичких анализа линеарног осцилатора уводи се појам фонона. Енергија линеарног осцилатора има облик:

$$E_n = (n+1/2)\hbar\omega; \quad n \in (0, 1, 2, \dots) \quad (1.1)$$

а прираштај енергије при преласку из стања n у стање $n+1$ износи $E_{n+1} - E_n = \hbar\omega$. Овај квант побуђења линеарног осцилатора, чија енергија износи $\hbar\omega$, назива се

фононом. Пошто је $\omega = \left(\frac{k}{m}\right)^{\frac{1}{2}}$, то произилази да енергија фонона зависи од масе m осцилатора и константе k која карактерише еластичну силу осцилатора, тј.

$$\hbar\omega = \hbar\left(\frac{k}{m}\right)^{\frac{1}{2}}.$$

Кристал се, у смислу његових осцилаторних карактеристика, може третирати као систем повезаних осцилатора, где један атом при свом осциловању трпи утицај свих осталих атома који га окружују и истовремено и сам утиче на њихово осциловање. На тај начин сваки квант осциловања у кристалу носи обележје целокупног колектива атома и сила које између њих делују. Због тога се у кристалима не може говорити о фононима као побуђењима индивидуалних атома већ о фононима који представљају кванте осциловања целог кристала.

Испитивање осцилаторних карактеристика кристала, у формалном, математичком смислу, своди се на тражење такве унитарне трансформације, која би хамилтонијан система везаних осцилатора превела у еквивалентни хамилтонијан система независних осцилатора [5].

Потенцијална енергија кристала може се представити у следећем облику:

$$W = \frac{1}{2} \sum_{\vec{n} \vec{m}} V(\vec{n} - \vec{m}), \quad (1.2)$$

где је $V(\vec{n} - \vec{m})$ енергија интеракције између атома у чворовима \vec{n} и \vec{m} . Горњи израз за потенцијалну енергију исправан је само на апсолутној нули, када су атоми „замрзнути“ у својим равнотежним положајима. Ако се температура повиси, атоми почињу да осцилују, тако да тренутни положај атома више не карактерише вектор већ временски зависни вектор

$$\vec{n} + \vec{\xi}(\vec{n}, t), \quad (1.3)$$

где $\vec{\xi}(\vec{n}, t)$ представља величину помераја атома из равнотежног положаја.

Уважавајући ово интеракција $V(\vec{n} - \vec{m})$ прелази у:

$$V\left\{ (\vec{n} - \vec{m}) + [\vec{\xi}(\vec{n}, t) - \vec{\xi}(\vec{m}, t)] \right\}. \quad (1.4)$$

Пошто су на ниским температурама помераји $\vec{\xi}$ мали, функција V се може развити у ред:

$$\begin{aligned} V\left\{ (\vec{n} - \vec{m}) + [\vec{\xi}(\vec{n}) - \vec{\xi}(\vec{m})] \right\} &\approx V(\vec{n} - \vec{m}) + \sum_{\vec{n} \vec{m} \alpha} \left[\frac{\partial V(\vec{n} - \vec{m})}{\partial(\vec{n} - \vec{m})_\alpha} \right]_{\vec{\xi}(\vec{n})=0} [\xi_\alpha(\vec{n}) - \xi_\alpha(\vec{m})] + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\vec{n} \vec{m} \alpha \beta} \left[\frac{\partial^2 V(\vec{n} - \vec{m})}{\partial(\vec{n} - \vec{m})_\alpha \partial(\vec{n} - \vec{m})_\beta} \right]_{\vec{\xi}(\vec{n}), \vec{\xi}(\vec{m})=0} [\xi_\alpha(\vec{n}) - \xi_\alpha(\vec{m})][\xi_\beta(\vec{n}) - \xi_\beta(\vec{m})], \end{aligned} \quad (1.5)$$

$$\alpha, \beta \in \{x, y, z\}.$$

Индексима α и β означене су пројекције вектора на осе Декартовог система. Стабилност кристала захтева да потенцијална енергија има минимум када су атоми у равнотежним положајима, па је отуда:

$$\left[\frac{\partial V(\vec{n} - \vec{m})}{\partial(\vec{n} - \vec{m})_\alpha} \right]_{\vec{\xi}(\vec{n})=0} = 0 \quad (1.6)$$

што значи да промену потенцијалне енергије која долази услед осциловања карактерише трећи члан израза на десној страни. Сумирајући овај члан по свим чворовима, и додајући му кинетичку енергију која настаје услед осциловања атома $\sum_{\vec{n} \alpha} \frac{M}{2} \dot{\xi}^2 \alpha(\vec{n})$, добија се осцилаторни хамилтонијан система

$$\begin{aligned} H &= \sum_{\vec{n} \alpha} \frac{M}{2} \dot{\xi}^2 \alpha(\vec{n}) + \frac{1}{4} \sum_{\vec{n} \vec{m}} C_{\alpha \beta}(\vec{n} - \vec{m}) [\xi_\alpha(\vec{n}) - \xi_\alpha(\vec{m})][\xi_\beta(\vec{n}) - \xi_\beta(\vec{m})], \\ C_{\alpha \beta}(\vec{n} - \vec{m}) &= \left[\frac{\partial^2 V(\vec{n} - \vec{m})}{\partial(\vec{n} - \vec{m})_\alpha \partial(\vec{n} - \vec{m})_\beta} \right]_{\vec{\xi}(\vec{n}), \vec{\xi}(\vec{m})=0} \end{aligned} \quad (1.7)$$

који представља поправку „замрзнутог“ полазног хамилтонијана, насталу услед осциловања атома. Између атома делују сile које најчешће веома брзо опадају са порастом растојања $(\vec{n} - \vec{m})$ између атома. Зато се израз за потенцијалну енергију из (1.7) може написати у апроксимацији најближих суседа. Она се састоји у томе да се сумирање по \vec{n} и \vec{m} замењује сумирањем по \vec{n} и $\vec{\lambda}$, где $\vec{\lambda}$ повезује атом на месту \vec{n} са његовим најближим суседима. За све најближе суседе интензитет $\vec{\lambda}$ је исти, па коефицијенти $C_{\alpha \beta}(\vec{\lambda})$ не зависе од $\vec{\lambda}$. Уважавајући ово хамилтонијан (1.7) постаје:

$$H = \sum_{\vec{n}\alpha} \frac{M}{2} \dot{\xi}_{\alpha}^2(\vec{n}) + \frac{1}{4} \sum_{\vec{n}\vec{\lambda}\alpha\beta} C_{\alpha\beta} [\xi_{\alpha}(\vec{n}) - \xi_{\alpha}(\vec{n} - \vec{\lambda})] [\xi_{\beta}(\vec{n}) - \xi_{\beta}(\vec{n} - \vec{\lambda})]. \quad (1.8)$$

Други Њутнов закон регулише динамичко понашање система везаних осцилатора:

$$M \ddot{\xi}_{\alpha}(\vec{n}) = F_{\alpha}(\vec{n}), \quad (1.9)$$

где $F_{\alpha}(\vec{n})$ представља компоненту силе која делује на атом у чвору \vec{n} . Она се добија диференцирањем потенцијалне енергије по компонентама помераја:

$$\begin{aligned} F_{\alpha}(\vec{n}) &= -\frac{1}{4} \frac{\partial}{\partial \xi_{\alpha}(\vec{n})} \sum_{\vec{m}\vec{\lambda}\gamma\beta} C_{\gamma\beta} [\xi_{\gamma}(\vec{m}) - \xi_{\gamma}(\vec{m} - \vec{\lambda})] [\xi_{\beta}(\vec{m}) - \xi_{\beta}(\vec{m} - \vec{\lambda})] = \\ &= -\frac{1}{4} \sum_{\vec{m}\vec{\lambda}\gamma\beta} C_{\alpha\beta} \{ [\xi_{\beta}(\vec{m}) - \xi_{\beta}(\vec{m} - \vec{\lambda})] \delta_{\gamma\alpha} (\delta_{\vec{m}\vec{n}} - \delta_{\vec{m},\vec{n}+\vec{\lambda}}) [\xi_{\gamma}(\vec{m}) - \xi_{\gamma}(\vec{m} - \vec{\lambda})] \delta_{\beta\alpha} (\delta_{\vec{m}\vec{n}} - \delta_{\vec{m},\vec{n}+\vec{\lambda}}) \} \end{aligned}$$

На основу (1.7) коефицијенти $C_{\alpha\beta}$ су симетрични: $C_{\alpha\beta} = C_{\beta\alpha}$, па израз за силу постаје:

$$F_{\alpha}(\vec{n}) = \frac{1}{2} \sum_{\beta\vec{\lambda}} C_{\alpha\beta} [\xi_{\beta}(\vec{n} + \vec{\lambda}) + \xi_{\beta}(\vec{n} - \vec{\lambda}) - 2\xi_{\beta}(\vec{n})] \quad (1.10)$$

тако да се (1.9) своди на:

$$M \ddot{\xi}_{\alpha}(\vec{n}) = \frac{1}{2} \sum_{\beta\vec{\lambda}} C_{\alpha\beta} [\xi_{\beta}(\vec{n} + \vec{\lambda}) + \xi_{\beta}(\vec{n} - \vec{\lambda}) - 2\xi_{\beta}(\vec{n})]. \quad (1.11)$$

Решење система једначина (1.11) тражи се у облику равних таласа

$$\xi_{\alpha}(\vec{n}) = A_{\alpha}(\vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{n} - it\omega(\vec{k})} \quad (1.12)$$

и ово доводи до следећег хомогеног система алгебарских једначина за компоненте амплитуда $A(\vec{k})$:

$$\sum_{\beta} [\omega^2(\vec{k}) \delta_{\alpha\beta} - f(\vec{k}) C_{\alpha\beta}] A_{\beta}(\vec{k}) = 0; \quad f(\vec{k}) = \frac{2}{M} \sum_{\lambda} \sin^2 \frac{\vec{k}\vec{\lambda}}{2}; \quad \alpha, \beta \in (x, y, z). \quad (1.13)$$

Да би систем имао нетривијална решења његова детерминанта мора бити једнака нули, тј.

$$0 = \det \left\| \omega^2(\vec{k}) \delta_{\alpha\beta} - f(\vec{k}) C_{\alpha\beta} \right\| = \begin{vmatrix} \omega^2(\vec{k}) - C_{xx} f(\vec{k}) & -C_{xy} f(\vec{k}) & -C_{xz} f(\vec{k}) \\ -C_{yx} f(\vec{k}) & \omega^2(\vec{k}) - C_{yy} f(\vec{k}) & -C_{yz} f(\vec{k}) \\ -C_{zx} f(\vec{k}) & -C_{zy} f(\vec{k}) & \omega^2(\vec{k}) - C_{zz} f(\vec{k}) \end{vmatrix}. \quad (1.14)$$

Услов (1.14) даје три позитивна решења за дозвољене фреквенције $\omega(\vec{k})$. Као и код изолованог осцилатора фреквенције зависе од масе атома M и Хукових константи еластичности $C_{\alpha\beta}$, али сада и од таласног вектора \vec{k} или, што је исто, од кристалног квазимпулса $\vec{p} = \hbar\vec{k}$. Ово значи да у кристалу постоји читав спектар фреквенција $\omega = \omega(\vec{k})$ чија вредност зависи од таласних дужина механичких таласа који се простиру кроз кристал.

За кристал просте кубне структуре и мале таласне векторе $ka \ll 1$, где је a константа кристалне решетке, функција $f(\vec{k})$ се може написати у облику:

$$f(\vec{k}) = \frac{a^2 k^2}{M}; \quad k = |\vec{k}|. \quad (1.15)$$

Ако се претпостави да су торзиони коефицијенти $C_{\alpha\beta}$; $\alpha \neq \beta$ занемарљиво мали у односу на коефицијенте истезања $C_{\alpha\alpha}$, онда се за фреквенције $\omega(k)$ добијају следећа три решења:

$$\omega_\alpha(k) = v_\alpha k; \quad v_\alpha = a \sqrt{\frac{C_{\alpha\alpha}}{M}}, \quad \alpha \in (x, y, z). \quad (1.16)$$

Пошто механичке осцилације средине нису ништа друго до простирање звучних таласа кроз ову средину, онда величине v_α представљају брзине различитих компоненти звучних таласа у кристалу. Значи, у кристалима са простом елементарном ћелијом све три компоненте фреквенције звучних таласа $\omega_\alpha(k)$ теже нули, када таласни вектор k тежи нули. За мале k звучни таласи имају линеаран закон дисперзије:

$$\varepsilon_\alpha(k) = \hbar \omega_\alpha(k) = \hbar k v_\alpha = p v_\alpha. \quad (1.17)$$

Квanti механичких побуђења са линеарним законом дисперзије називају се акустичким фононима. Ако се на сличан начин анализира кристал сложене структуре, са σ подрешетки, онда се за дозвољене фреквенције добија 3σ решења. При томе три фреквенције увек теже нули када $k \rightarrow 0$ и одговарају акустичким фононима, док за остале $3\sigma - 3$ важи $\lim_{k \rightarrow 0} \omega(k) \neq 0$. Механичке осцилације са овом особином називају се оптичким фононима.

Унитарна трансформација којом се хамилтонијан система везаних осцилатора (1.8) своди на хамилтонијан система независних осцилатора састоји се у развијању помераја $\xi(\vec{n}, t)$ по равним таласима типа (1.12):

$$\hat{\xi}(\vec{n}, t) = \sum_{\vec{k}} \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_j(\vec{k})}} \hat{l}_j(\vec{k}) \left[b_j(\vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{n} - it\omega_j(\vec{k})} + b_j^+(\vec{k}) e^{-i\vec{k}\vec{n} - it\omega_j(\vec{k})} \right], \quad j \in (1, 2, 3) \quad (1.18)$$

Коефицијенти развоја су Бозе-оператори $b_j^+(\vec{k})$ и $b_j(\vec{k})$ који креирају, односно анихилирају фононе са енергијом $\hbar\omega_j(\vec{k})$. Увођењем Бозе-амплитуда као коефицијената у развоју (1.18), прелази се на квантномеханички третман осцила-

торних појава у кристалу. Вектори $\vec{l}_j(\vec{k})$ су поларизациони фононски вектори. Њихове компоненте $\vec{l}_{j\alpha}(\vec{k})$ задовољавају једначине (1.13). За три вредности фреквенције $\omega(\vec{k})$ које даје систем (1.13), добијају се три вектора $\vec{l}_j(\vec{k})$. За један од њих узима се $\vec{l} \parallel \vec{k}$ и он одговара лонгитудиналним звучним таласима, а остала два вектора нормална међусобно и на правац вектора \vec{k} , одговарају трансверзалним звучним таласима. Како једначине типа (1.13) дозвољавају произвољан избор једног решења, вектори $\vec{l}_j(\vec{k})$ се могу нормирати на следећи начин:

$$\vec{l}_j(\vec{k}) \cdot \vec{l}_{j'}(\vec{k}) = \delta_{jj'}, \quad j, j' \in \{1, 2, 3\}. \quad (1.19)$$

Фреквенције $\omega_\alpha(\vec{k})$ и брзине v_α се могу идентификовати са фреквенцијама и брзинама лонгитудиналних и трансверзалних таласа, тј:

$$\omega_\alpha \rightarrow \omega_j(\vec{k}) = v_j k; \quad j \in \{1, 2, 3\}. \quad (1.20)$$

Заменом (1.18) у (1.8), уз коришћење једначина кретања (1.11) и услова:

$$\sum_{\vec{n}} e^{\pm i \vec{n} \vec{k}} = N \delta_{\vec{k}, 0} \quad (1.21)$$

који се доказује на основу чињенице да су компоненте вектора \vec{n} и \vec{k} дате са:

$$(\vec{n})_\alpha = n_\alpha a_\alpha; \quad (\vec{k})_\alpha = \frac{2\pi v_\alpha}{N_\alpha a_\alpha}; \quad -\frac{N_\alpha}{2} \leq v_\alpha, n_\alpha \leq \frac{N_\alpha}{2}; \quad \alpha \in \{1, 2, 3\} \quad (1.22)$$

где су n_α и v_α цели бројеви, а N_α бројеви атома дуж одговарајућих оса, хамилтонијан (1.8) постаје:

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}} \left[\hat{n}_j(\vec{k}) + \frac{1}{2} \right] \hbar \omega_j(\vec{k}); \quad \hat{n}_j(\vec{k}) = b_j^+(\vec{k}) b_j(\vec{k}). \quad (1.23)$$

Види се да је хамилтонијан целог система дат као суме хамилтонијана независних осцилатора:

$$\hat{H}_{\vec{k}} = \left[\hat{n}_j(\vec{k}) + \frac{1}{2} \right] \hbar \omega_j(\vec{k}). \quad (1.24)$$

Диференцирањем укупне енергије по броју фонона добијају се енергије фонона:

$$\varepsilon_j(\vec{k}) = \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{n}_j(\vec{k})} = \hbar \omega_j(\vec{k}). \quad (1.25)$$

Ако се одбаци енергија нултих осцилација $\frac{1}{2} \sum_{\vec{k}, j} \hbar \omega_j(\vec{k})$, средња енергија се израчунава по образцу:

$$U = \langle \hat{H} \rangle = \sum_{\vec{k}, j} \hbar \omega_j(\vec{k}) \langle \hat{n}_j(\vec{k}) \rangle. \quad (1.26)$$

Како су фонони квазичестице хемијски потенцијал им је једнак нули. Пошто се ради о бозонским квазичестицама, средњи број бозона у квантном стању k износи:

$$\langle \hat{n}_j(\vec{k}) \rangle = \left[e^{\frac{\hbar \omega_j(\vec{k})}{\theta}} - 1 \right]^{-1}. \quad (1.27)$$

Ако се приближно узме да су брзине за све три компоненте звучних таласа међусобно једнаке $v_1=v_2=v_3\equiv v$, а за фреквенције искористи израз (1.20), који одговара апроксимацији малих таласних вектора, израз (1.26) постаје:

$$U = 3 \sum_{\vec{k}} \hbar v k \left(e^{\frac{\hbar v k}{\theta}} - 1 \right)^{-1}. \quad (1.28)$$

Сумирање по дискретним \vec{k} замењује се интегралом по правилу:

$$\sum_{\vec{k}} = \frac{V}{(2\pi)^2} \int d^3 \vec{k} \quad (1.29)$$

па се за израчунавање унутрашње енергије добија следећа формула:

$$U = \frac{3\hbar v V}{2\pi^2} \int_0^{k_D} dk \, k^3 \left(e^{\frac{\hbar v k}{\theta}} - 1 \right)^{-1}. \quad (1.30)$$

Горња граница интеграла је тзв. Дебајев таласни вектор. Он се може израчунати на основу релације $\sum_{\vec{k}} 1 = N$ која је на основу (1.22) очигледна. Ако се узме да је $V=Na^3$ где a^3 представља запремину елементарне ћелије кристала и од сумирања по \vec{k} пређе на интеграцију по истој варијабли добија се:

$$k_D = \frac{1}{a} (6\pi^2)^{1/3}; \quad \omega_D = v k_D = \frac{v}{a} (6\pi^2)^{1/3}. \quad (1.31)$$

Фреквенција ω_D назива се Дебајевом фреквенцијом.

За веома ниске температуре $\theta \approx 0$ у формулама (1.30) се може извршити замена $\frac{\hbar v k}{\theta} = x$ и горња граница интеграла $\frac{\hbar v k_D}{\theta}$ узети као приближно бесконачна, па се налази да је:

$$U = \frac{9V}{2\pi^2(\hbar v)^3} \left(\sum_{n=1}^{\infty} n^{-4} \right) \theta^4. \quad (1.32)$$

Диференцирањем овог израза по апсолутној температури добија се специфична топлота при сталној запремини:

$$C_V = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{18VK_B^4}{\pi^2(\hbar v)^3} \left(\sum_{n=1}^{\infty} n^{-4} \right) T^3. \quad (1.33)$$

Добијени резултат представља познати Дебајев закон по коме специфична топлота кристала тежи нули када температура тежи нули, и то пропорционално трећем степену температуре.

У области високих температура се може узети да је $\frac{\hbar v k}{\theta} \ll 1$ и $\left(e^{\frac{\hbar v k}{\theta}} - 1 \right)^{-1}$ приближно заменити са $\frac{\theta}{\hbar v k}$. Заменом k_D (1.31) долази се до резултата

$$U = 3N\theta = 3NK_B T, \quad (1.34)$$

па је специфична топлота при сталној запремини:

$$C_V = \frac{\partial U}{\partial T} = 3NK_B = \text{const.}, \quad (1.35)$$

Уколико је број N атома у кристалу једнак Авогадровом броју, онда је $NK_B = R$ па је $C_V = 3R$ што представља познати Дилон-Петијев закон по коме је специфична топлота свих чврстих супстанци приближно иста и једнака трострукој вредности гасне константе R .

1.2. Екситони

Оптичко побуђивање кристала врши се квантима светлости. У зависности од типа кристала, оптичка побуђења се могу сврстати у две групе. Једну групу чине оптичка побуђења полупроводничких кристала и називају се екситонима Ванијеа и Мота. У другу групу спадају побуђења молекуларних кристала и називају се Френкеловим екситонима.

Екситон Ваније-Мота настаје тако што квант светлости избаци електрон из попуњене зоне полупроводника у проводну зону, али тако да он остане везан са насталом шупљином услед привлачне електростатичке сile [2]. Овај електронеутрални комплекс: електрон у проводној зони и шупљина у попуњеној зони, премешта се кроз кристал, примајући сва обележја његове унутрашње динамике и структуре, па се због тога може третирати као квант побуђења целокупног кристала. Размак између електрона и шупљине док они сачињавају екситон може да буде и реда 10^{-6} m, па се отуда Ваније-Мотови екситони називају екситонима великог радијуса.

И Френкелов екситон сачињава пар електрон-шупљина, али овај пар остаје у самом молекулу [2]. Радијус Френкелових екситона је реда 10^{-10} m, па се они често називају екситонима малог радијуса. Сам екситон, као колективно побуђење кристала, настаје тако што квант светлости у молекулу на једном чвору пребаци електрон из основног у неко побуђено стање, али се услед сила које делују између молекула ово побуђење не задржава само на датом молекулу, већ се преноси и на све остале, тако да се у кристалу створи талас побуђења који се назива екситоном. Треба истаћи да сам електрон остаје у молекулу, а кроз кристал се преноси само квант побуђења.

Овде ће бити анализирани екситони који настају у молекуларним кристалима и то они који долазе као резултат електронских побуђења у молекулу. Ради једноставијег рачуна уводи се претпоставка да кристал има просту решетку и да светлост пребације електроне из основног стања, које ће бити означено индексом „0“, у само једно побуђено стање, које ће бити означено индексом „S“. Прекривање таласних функција електрона суседних молекула се у молекуларним кристалима може занемарити, па је најпогодније да се приликом њихове анализе пође од хамилтонијана типа (1.36):

$$\hat{H} = \sum_{\vec{n}} \hat{H}_{\vec{n}} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} V_{\vec{n}\vec{m}}, \quad (1.36)$$

где је $\hat{H}_{\vec{n}}$ хамилтонијан изолованог молекула, а $V_{\vec{n}\vec{m}}$ интеракције између молекула на чворовима \vec{n} и \vec{m} . У складу са овим, хамилтонијан електронског подсистема у молекуларном кристалу може се написати у облику:

$$\hat{H} = \sum_{\vec{n}f} E_f a_{\vec{n}f}^+ a_{\vec{n}f} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\vec{n} \vec{m} \\ f, f', f'', f'''}} V_{\vec{n}\vec{m}} (f f' f'' f''') a_{\vec{n}f}^+ a_{\vec{m}f'}^+ a_{\vec{m}f''} a_{\vec{n}f'''}. \quad (1.37)$$

Оператори $a_{\bar{n}f}^+$ и $a_{\bar{n}f}$ креирају, односно анихилирају електрон на чврту \bar{n} у квантном стању f . Они задовољавају фермионске комутационе релације, уз допунски услов:

$$\sum_f a_{\bar{n}f}^+ a_{\bar{n}f} = 1, \quad (1.38)$$

који означава да се за сваки чврт посматра понашање искључиво једног електрона. Енергије E_f су електронске енергије и реда су величине неколико eV. Коефицијенти $V_{\bar{n}\bar{m}}(f f' f'' f''')$ су матрични елементи оператора дипол-диполне интеракције узети по својственим функцијама хамилтонијана изолованог молекула: $\hat{H}_{\bar{n}} \varphi_f(\vec{\xi}_{\bar{n}}) = E_f \varphi_f(\vec{\xi}_{\bar{n}})$. Облик коефицијената је следећи:

$$V_{\bar{n}\bar{m}}(f f' f'' f''') = \int d^3 \vec{\xi}_{\bar{m}} \varphi_f^*(\vec{\xi}_{\bar{n}}) \varphi_{f'}^*(\vec{\xi}_{\bar{m}}) \hat{D}(\bar{n}-\bar{m}) \varphi_{f''}(\vec{\xi}_{\bar{m}}) \varphi_{f'''}(\vec{\xi}_{\bar{m}}) \\ \hat{D}(\bar{n}-\bar{m}) = \frac{e^2}{|\bar{n}-\bar{m}|^3} \left\{ \vec{\xi}_{\bar{n}} \vec{\xi}_{\bar{m}} - \frac{3[\vec{\xi}_{\bar{n}}(\bar{n}-\bar{m})][\vec{\xi}_{\bar{m}}(\bar{n}-\bar{m})]}{|\bar{n}-\bar{m}|^2} \right\}; \quad V_{\bar{n}\bar{m}} = V_{\bar{m}\bar{n}}; \quad V_0 = 0, \quad (1.39)$$

а по реду величине достиже највише 0,1eV. Са $\vec{\xi}$ је означен скуп унутрашњих координата молекула, а домен интеграције по $\vec{\xi}$ је реда величине запремине молекула због брзог опадања функције $\varphi_f(\vec{\xi}_{\bar{n}})$. Индекси f, f', f'' и f''' узимају, само две вредности: 0 и S. Тада се допунски услов 20.2 своди на:

$$a_{\bar{n}0}^+ a_{\bar{n}0} + a_{\bar{n}S}^+ a_{\bar{n}S} = 1. \quad (1.40)$$

Пошто екситони настају као резултат преласка електрона из основног стања 0 у побуђено стање S, овај прелаз се може третирати као рађање кванта побуђења чија је енергија $E_S - E_0$, при чему се овај квант сели са молекула на молекул. Оператори који рађају или уништавају овакве квантне могу се дефинисати преко електронских оператора на следећи начин [6]:

$$P_{\bar{n}S}^+ = a_{\bar{n}S}^+ a_{\bar{n}0}; \quad P_{\bar{n}S} = a_{\bar{n}0}^+ a_{\bar{n}S}. \quad (1.41)$$

Пошто се ради о два квантна стања 0 и S, у ова стања се у општем случају могу сместити два електрона, тако да за сваки чврт укупни простор електронских стања је:

$$|0_0 0_S\rangle; |0_0 1_S\rangle; |1_0 0_S\rangle; |0_0 1_S\rangle. \quad (1.42)$$

Услов (1.40) издваја из овог укупног простора подпростор:

$$|1_0 0_S\rangle; |0_0 1_S\rangle \quad (1.43)$$

јер само у њему важи $a_0^+ a_0 + a_S^+ a_S = 1$. У остатку укупног простора није испуњено (1.40) а дејство оператора P^+ и P на стања $|0_0 0_S\rangle$ и $|1_0 1_S\rangle$ увек као резултат даје нулу. Због тога се при одређивању комутационих релација за P^+ и P не мора узи-

мати цео простор (1.42), већ само подпростор (1.43). Пошто у овом подпростору продукти типа $a_S^+ a_0^+ a_0 a_S$ дају нулти резултат делујући на оба његова стања, постају очигледне следеће релације:

$$\begin{aligned} P_{\bar{n}S}^+ P_{\bar{n}S} &= a_{\bar{n}S}^+ a_{\bar{n}0} a_{\bar{n}0}^+ a_{\bar{n}S} = a_{\bar{n}S}^+ a_{\bar{n}S} - a_{\bar{n}S}^+ a_{\bar{n}0}^+ a_{\bar{n}0} a_{\bar{n}S} = a_{\bar{n}S}^+ a_{\bar{n}S} \\ P_{\bar{n}S} P_{\bar{n}S}^+ &= a_{\bar{n}0}^+ a_{\bar{n}S} a_{\bar{n}S}^+ a_{\bar{n}0} = a_{\bar{n}0}^+ a_{\bar{n}0} - a_{\bar{n}0}^+ a_{\bar{n}S}^+ a_{\bar{n}S} a_{\bar{n}0} = a_{\bar{n}0}^+ a_{\bar{n}0} \\ P_{\bar{n}S} P_{\bar{n}S}^+ + P_{\bar{n}S}^+ P_{\bar{n}S} &= a_{\bar{n}0}^+ a_{\bar{n}0} + a_{\bar{n}S}^+ a_{\bar{n}S} = 1 \end{aligned} \quad (1.44)$$

На основу комутационих релација за Ферми-операторе закључује се и следеће:

$$P_{\bar{n}S}^{+2} = a_{\bar{n}S}^+ a_{\bar{n}0} a_{\bar{n}S}^+ a_{\bar{n}0} = -a_{\bar{n}S}^{+2} a_{\bar{n}0}^2 = 0; \quad P_{\bar{n}S}^2 = a_{\bar{n}0}^+ a_{\bar{n}S} a_{\bar{n}0}^+ a_{\bar{n}S} = -a_{\bar{n}0}^{+2} a_{\bar{n}S}^2 = 0 \quad (1.45)$$

$$P_{\bar{n}S} P_{\bar{m}S}^+ - P_{\bar{m}S}^+ P_{\bar{n}S} = a_{\bar{n}0}^+ a_{\bar{n}S} a_{\bar{m}S}^+ a_{\bar{m}0} = a_{\bar{m}S}^+ a_{\bar{m}0} a_{\bar{n}0}^+ a_{\bar{n}S} = a_{\bar{n}0}^+ a_{\bar{n}S} a_{\bar{m}S}^+ a_{\bar{m}0} - a_{\bar{n}0}^+ a_{\bar{n}S} a_{\bar{m}S}^+ a_{\bar{m}0} = 0,$$

па је коначни закључак да су оператори P^+ и P Паули-оператори:

$$\begin{aligned} [P_{\bar{n}}, P_{\bar{m}}^+] &= (1 - 2P_{\bar{n}}^+ P_{\bar{n}}) \delta_{\bar{n}\bar{m}}; \quad [P_{\bar{n}}, P_{\bar{m}}] = [P_{\bar{n}}^+, P_{\bar{m}}^+] = 0; \\ P_{\bar{n}}^2 &= P_{\bar{n}}^{+2} = 0; \quad (P_{\bar{n}}^+ P_{\bar{n}}) = (a_{\bar{n}S}^+ a_{\bar{n}S}) \leq 0 \text{ и } 1. \end{aligned} \quad (1.46)$$

Развијањем суме по индексима f и коришћењем релација (1.41) и (1.44), хамилтонијан (1.37) се може изразити преко Паули-оператора на следећи начин:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= H_0 + \sum_{\bar{n}} \Delta P_{\bar{n}}^+ P_{\bar{n}} + \frac{1}{2} \sum_{\bar{n} \bar{m}} C_{\bar{n}\bar{m}} P_{\bar{n}}^+ P_{\bar{m}} + \frac{1}{2} \sum_{\bar{n} \bar{m}} D_{\bar{n}\bar{m}} P_{\bar{n}}^+ P_{\bar{n}} P_{\bar{m}}^+ P_{\bar{m}} + \frac{1}{2} \sum_{\bar{n} \bar{m}} (F_{\bar{n}\bar{m}}^* P_{\bar{n}}^+ P_{\bar{m}}^+ + F_{\bar{n}\bar{m}} P_{\bar{m}}^+ P_{\bar{n}}) \\ H_0 &= NE_0 + \frac{1}{2} \Phi_0(0000); \quad \Delta = E_S - E_0 + \frac{1}{2} \Phi_0(S00S) + \frac{1}{2} \Phi_0(OSS0) - \Phi_0(0000) \quad (1.47) \\ C_{\bar{n}\bar{m}} &= V_{\bar{n}\bar{m}}(SOS0) + V_{\bar{n}\bar{m}}(OSOS); \quad F_{\bar{n}\bar{m}} = V(00SS); \quad F_{\bar{n}\bar{m}}^* = V(SS00); \\ D_{\bar{n}\bar{m}} &= V_{\bar{n}\bar{m}}(SSSS) + V_{\bar{n}\bar{m}}(0000) - V_{\bar{n}\bar{m}}(S00S) - V_{\bar{n}\bar{m}}(OSS0); \quad \Phi_0(abcd) = \sum_{\bar{l}} V_{\bar{l}}(abcd) \end{aligned}$$

Треба напоменути да је овај израз добијен под претпоставком да кристал има центар инверзије и да се овај поклапа са центром инверзије сваког од молекула. Због тога су сви коефицијенти $V(f f' f'' f''')$ са три или са једним индексом различитим од нуле једнаки нули. Ради се о томе да су матрични елементи оператора дипол-диполне интеракције пропорционални производима диполних момената прелаза $V(f' f'' f''') \sim (e\xi)^{0f} (\bar{\xi})^{0f'} (e\bar{\xi})^{0f''} (e\xi)^{0f'''}$ па је $V(f f' f'' 0) \sim (e\xi)^{0f} (e\bar{\xi})^{0f'} (e\xi)^{0f''}$ и $V(f 000) \sim (e\bar{\xi})^{0f}$. При инверзији $\xi \rightarrow -\bar{\xi}$ величине $V(f f' f'' 0)$ и $V(f 000)$ мењају знак. Због постојања центра инверзије хамилтонијан не сме да мења вредност при прелазу $\xi \rightarrow -\bar{\xi}$, па су због тога коефицијенти $V(f f' f'' 0)$ и $V(f 000)$

једнаки нули. У даљим анализама последњи члан у хамилтонијану (1.47) неће бити узиман у обзир, јер он даје незнатне доприносе енергијама екситона, који су за фактор $\frac{V}{\Delta} \sim \frac{0,1}{10} \sim 0,01$ мањи од доприноса осталих делова хамилтонијана. То значи да ће у даљем бити коришћен следећи, ефективни хамилтонијан:

$$\hat{H} = H_0 + \sum_{\vec{n}} \Delta P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{n} \vec{m}} C_{\vec{n} \vec{m}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{n} \vec{m}} D_{\vec{n} \vec{m}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}} P_{\vec{m}}^+ P_{\vec{m}}. \quad (1.48)$$

На основу добијеног хамилтонијана могу се одредити екситонске енергије. Овде ће то бити учињено у Богољубљевој апроксимацији која се назива приближно друга квантизација.

У хамилтонијану (1.48) Паули-оператори P замене се Бозе-операторима B и одбаци се члан који садржи производ четири оператора. Тако се долази до хамилтонијана:

$$\hat{H}_{pdk} = \sum_{\vec{n}} \Delta B_{\vec{n}}^+ B_{\vec{n}} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{n} \vec{m}} C_{\vec{n} \vec{m}} B_{\vec{n}}^+ B_{\vec{m}}. \quad (1.49)$$

Хамилтонијан се дијагонализује преласком у простор таласних вектора \vec{k} :

$$B_{\vec{n}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} B_{\vec{k}} e^{i \vec{k} \cdot \vec{n}} \quad (1.50)$$

После замене (1.50) у (1.49) се добија:

$$\hat{H}_{pdk} = \sum_{\vec{k}} E_{\vec{k}} B_{\vec{k}}^+ B_{\vec{k}} \quad (1.51)$$

где је $E_{\vec{k}} = \Delta + C_{\vec{k}}$ и $C_{\vec{k}} = \sum_{\vec{m}} C_{0 \vec{m}} e^{-i \vec{k} \cdot \vec{m}}$. Величина Δ је неколико електрон-волти, док је C реда 0,1-0,01eV, па је код екситона ширина зоне знатно мања од енергије Δ побуђивања изолованог молекула. За мале таласне векторе екситони имају квадратни закон дисперзије и третирају се као квази - честице са ефективном масом $m^* = \frac{\hbar^2}{C a^2}$, где је C дипол - диполна интеракција за најближе суседе и a -константа решетке.

Основну тешкоћу теорије екситона представља чињеница да оператори P^+ и P нису ни Бозе ни Ферми оператори, већ некакав хибрид једних и других, са кинематиком (1.46), која је за један чвор фермионска, а за различите чворове бозонска. Да би се урадиле прецизније анализе појава у екситонском систему, које обухватају ефекте међуекситонске интеракције, у хамилтонијану (1.48) се Паули-оператори замењују својим егзактним бозонским репрезентима [7]:

$$P = \left[\sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-2)^{\nu}}{(1+\nu)!} B^{+\nu} B^{\nu} \right]^{\frac{1}{2}} B; \quad P^+ = B^+ \left[\sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-2)^{\nu}}{(1+\nu)!} B^{+\nu} B^{\nu} \right]^{\frac{1}{2}}; \quad (1.52)$$

$$P^+ P = \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-2)^{\nu}}{(1+\nu)!} B^{+\nu+1} B^{\nu+1}$$

и у бесконачним бозонским редовима задржава онолико чланова колико то захтева прецизност анализе. Први чланови ових редова репродукују хамилтонијан (1.48), али у бозонској слици, а виши чланови из редова (1.52) дају допунске чланове у (1.48) који карактеришу тзв. кинематичку интеракцију у систему. Назив потиче отуда што ови допунски чланови дугују свој настанак разлици између бозонске и паулионске кинематике, тј. разлици између комутационих релација (1.46) и бозонских комутационих релација. Последњи члан у (1.48) изражен било у Паули било у Бозе-операторима карактерише динамичку интеракцију у систему и своје порекло води од динамике електронског подсистема, изражене другим чланом у хамилтонијану (1.37). Ако се у хамилтонијану (1.48) Паули-оператори просто замене Бозе-операторима, тада се члан који карактерише динамичку интеракцију не сме укључивати у рачун, јер би то довело до превишења тачности. Он се мора и сме узети у обзир тек када се у рачун уведу и одговарајуће кинематичке поправке четвртог реда, које настају од паулионских форми другог реда из (1.48), после замене (1.52).

1.3. Спински таласи

Савремена теорија магнетизма разматра феромагнетик као систем уређених спинова непопуњених 3d љуски прелазних метала-гвожђа, никла и кобалта. Спинови образују магнетну кристалну решетку и повезани су међусобно квантномеханичким силама измене, којима одговарају изменски потенцијали $I_{\vec{n}\vec{m}}$. Анализа особина феромагнетика се врши најчешће у оквирима Хајзенберговог изотропног модела, по коме је хамилтонијан система спинова дат са [5], [8]:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} \vec{S}_{\vec{n}} \vec{S}_{\vec{m}} ; I_{\vec{n}\vec{m}} = I_{\vec{n}-\vec{m}} ; I_0 = 0 \quad (1.53)$$

где су $\vec{S}_{\vec{n}}$ и $\vec{S}_{\vec{n}} \vec{S}_{\vec{m}}$ спинови у чворовима \vec{n} и \vec{m} . Уколико се феромагнетик налази у спољашњем магнетном пољу $\vec{\mathcal{H}}$ онда се у хамилтонијану појављује допунски члан,

$$-\mu \vec{\mathcal{H}} \sum_{\vec{n}} S_{\vec{n}}^z , \quad (1.54)$$

где је μ магнетни моменат атома изражен у Боровим магнетонима. Спинови се оријентишу дуж поља и за ову оријентацију спинова, или чешће-осу квантације, бира се z -оса Декартовог система.

Основна претпоставка квантне теорије феромагнетизма састоји се у томе што се узима да су на апсолутној нули сви спинови паралелно оријентисани и да су z -пројекције спинова свих атома једнаке максималној вредности спина S . Тада магнетизација кристала има максималну вредност $M(0)=\mu N S$, где је N број атома у кристалу. Пораст температуре доводи до отклањања z -пројекција спинова од њихове максималне вредности S , а ово изазива смањивање магнетизације, тако да она на некој температури θ_c , која се назива Киријевом температуром, постаје једнака нули и феромагнетик прелази у парамагнетну фазу. Промене магнетизације са температуром најлакше је пратити преко релативне магнетизације узете по једном чвиру решетке и по јединици магнетног момента:

$$\sigma = \frac{\langle S_{\vec{n}}^z \rangle}{S} . \quad (1.55)$$

Да би се могла израчунати величина σ потребно је да се детаљније размотри шта се дешава са системом уређених спинова када феромагнетик почне да се загрева. Моделна представа је следећа: топлотни квант смањи пројекцију спина на једном чвиру за јединицу, а овај се „поремећај“ због сила измене преноси и на остале чворове магнетне решетке, тако да се у систему појави талас „залјуљаних“ спинова, који се обично назива спинским таласом. Са порастом температуре интензивност спинских таласа расте, док коначно не дође до ситуације у којој настаје тотална „разуђеност“ система спинова, која уствари означава прелазак у парамагнетну фазу. То значи да се елементарне ексцитације система уређених спинова састоје од промена вредности z -компоненте спина. Пошто оператор $S^z = S^x + iS^y$ повећава z -пројекцију за јединицу (делујући на вектор стања $|S^z\rangle$ прево-

ди га у $|S^z + 1\rangle$, а оператор $S^- = S^x - iS^y$ је смањен за јединицу, може се узети да S^- креира побуђења система, док их S^+ анихилира. Да би се овакво резоновање могло укључити у прорачуне, неопходно је да се хамилтонијан (1.53) изрази преко оператора S^- , S^+ и $S-S^z$, при чему овај последњи представља меру одступања величине S^z од њене максималне вредности S .

С обзиром да се вектор \vec{S} може написати у облику:

$$S = S^x \vec{i} + S^y \vec{j} + S^z \vec{k} = \frac{S^+ + S^-}{2} \vec{i} + \frac{S^+ - S^-}{2i} \vec{j} + [S - (S - S^z)] \vec{k}$$

и да спински оператори на различитим чворовима решетке комутирају, хамилтонијан (1.53) постаје:

$$\hat{H} = SJ_0 \sum_{\vec{n}} (S - S_{\vec{n}}^z) - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} S_{\vec{n}}^- S_{\vec{m}}^+ - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} (S - S_{\vec{n}}^z)(S - S_{\vec{m}}^z); \quad J_0 = \sum_{\vec{l}} I_{\vec{l}} \quad (1.56)$$

или, ако се укључи и члан (1.54):

$$\hat{H} = (\mu \mathcal{K} + SJ_0) \sum_{\vec{n}} (S - S_{\vec{n}}^z) - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} S_{\vec{n}}^- S_{\vec{m}}^+ - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} (S - S_{\vec{n}}^z)(S - S_{\vec{m}}^z). \quad (1.57)$$

Приликом добијања резултата (1.56) коришћено је правило сумирања:

$$\sum_{\vec{n}\vec{m}} \hat{A}_{(\vec{n})} F_{(\vec{n}-\vec{m})} = \sum_{\vec{n}\vec{l}} \hat{A}_{(\vec{n})} F_{(\vec{l})} = \sum_{\vec{n}} F_0 \hat{A}_{(\vec{n})}; \quad F_0 = \sum_{\vec{l}} F_{(\vec{l})}. \quad (1.58)$$

Даља анализа феромагнетика захтева да се испита кинетика оператора који улазе у састав хамилтонијана (1.57), тј. да се пронађу комутационе релације за спинске операторе. Опште комутационе релације за компоненте момената \vec{L} добијају се цикличном пермутацијом оператора у изразу $[L^\alpha, L^\beta] = iL^\gamma$, па отуда за $\alpha=x, \beta=y$ и $\gamma=z$ следи:

$$[S^x, S^y] = iS^z; \quad [S^z, S^x] = iS^y; \quad [S^y, S^z] = iS^x; \quad (1.59)$$

односно:

$$[S^+, S^-] = 2S^z; \quad [S^+, S^z] = -S^+; \quad [S^-, S^z] = S^-. \quad (1.60)$$

С обзиром на чињеницу да је $(S^x)^2 + (S^y)^2 + (S^z)^2 = S(S+1)$ и $\frac{1}{2} \{S^+, S^-\} = (S^x)^2 + (S^y)^2$ долази се до још једне релације која је понекад важна за анализу спинског система:

$$\{S^+, S^-\} = 2S(S+1) - 2(S^z)^2. \quad (1.61)$$

Треба истаћи да спински оператори који се односе на различите чворове кристала међусобно комутирају, а да су дозвољене вредности z -пројекције спина $-S, -S+1, \dots, S-1, S$, тако да оператор $S-S^z$ има коначан скуп својствених вредности:

$$0, 1, 2, \dots, 2S. \quad (1.62)$$

Из горе наведених релација види се да комутационе релације за спинске операторе нису ни бозонског ни фермионског типа. Ова чињеница представља једну од основних тешкоћа које се појављују у квантној теорији магнетизма. Због тога се врше различите апроксимације, које се углавном састоје у томе што се спински оператори са различитим степеном тачности изражавају преко Бозе-оператора. Блох је изразио спинске операторе преко Бозе-оператора на следећи начин:

$$S_{\vec{n}}^+ = \sqrt{2S} B_{\vec{n}}; \quad S_{\vec{n}}^- = \sqrt{2S} B_{\vec{n}}^+; \quad S - S_{\vec{n}}^z = B_{\vec{n}}^+ B_{\vec{n}}. \quad (1.63)$$

С обзиром на дозвољене својствене вредности оператора $S-S^z$ очигледно је да је Блохова апроксимација добра само док својствене вредности оператора B^+B не прелазе вредност $2S$, а то значи у оним случајевима када је систем слабо побуђен, па је $\langle B_{\vec{n}}^+ B_{\vec{n}} \rangle$ мало. Блохова апроксимација је такође боља и уколико је спин већи. Осим апроксимације (1.63) у Блоховој теорији се одбацује и последњи члан из формула (1.56) односно (1.57) који би био типа B^+BB^+B и одговарао процесима расејања спинских таласа. С обзиром на све ово, хамилтонијан Блоховог модела има облик:

$$\hat{H} = (\mu \mathcal{K} + SJ_0) \sum_{\vec{n}} B_{\vec{n}}^+ B_{\vec{n}} - S \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} B_{\vec{n}}^+ B_{\vec{m}}. \quad (1.64)$$

Ако се изврше Фурије трансформације:

$$B_{\vec{n}} = N^{-\frac{1}{2}} \sum_{\vec{k}} B_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{n}}; \quad B_{\vec{n}}^+ = N^{-\frac{1}{2}} \sum_{\vec{k}} B_{\vec{k}}^+ e^{-i\vec{k}\cdot\vec{n}}; \quad I_{\vec{n}\vec{m}} = N^{-1} \sum_{\vec{k}} J_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{n}-\vec{m})} \quad (1.65)$$

и узме у обзир (1.21), хамилтонијан добија дијагоналан облик:

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}} [\mu \mathcal{K} + S(J_0 - J_{\vec{k}})] B_{\vec{k}}^+ B_{\vec{k}} \quad (1.66)$$

или за $\mathcal{K} = 0$:

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}} \varepsilon_{\vec{k}} B_{\vec{k}}^+ B_{\vec{k}}; \quad \varepsilon_{\vec{k}} = S(J_0 - J_{\vec{k}}). \quad (1.67)$$

Енергије $\varepsilon_{\vec{k}}$ су енергије спинских таласа, или енергије магнона, како се елементарна побуђења у феромагнетицима чешће називају. За просту кубну решетку у апроксимацији најближих суседа и апроксимацији малих таласних вектора израз за $\varepsilon_{\vec{k}}$ постаје:

$$\varepsilon_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}; \quad m^* = \frac{\hbar^2}{2SIa^2}. \quad (1.68)$$

Као што се види енергија магнона за мале k има облик кинетичке енергије честица, при чему је права, честична маса, овде замењена ефективном масом m^* . Величина I је вредност интеграла измене $I_{\vec{n}\vec{m}}$ за најближе 'суседе, док a представља константу кристалне решетке.

С обзиром на (1.55) и (1.63), релативну магнетизацију треба рачунати по обрасцу:

$$\sigma = 1 - S^{-1} \langle B_{\vec{n}}^\dagger B_{\vec{n}} \rangle. \quad (1.69)$$

Ако се изврши замена (1.65) у (1.69) и узме у обзир да је због ортогоналности својствених вектора $\langle B_{\vec{k}}^\dagger B_{\vec{q}} \rangle = \langle B_{\vec{k}}^\dagger B_{\vec{k}} \rangle \delta_{\vec{k}\vec{q}}$ за магнетизацију се добија израз:

$$\sigma = 1 - \frac{1}{NS} \sum_{\vec{k}} \langle B_{\vec{k}}^\dagger B_{\vec{k}} \rangle = 1 - (NS)^{-1} \sum_{\vec{k}} \left(e^{\frac{\varepsilon_{\vec{k}}}{\theta}} - 1 \right)^{-1}. \quad (1.70)$$

Ако се у (1.65) $\varepsilon_{\vec{k}}$ замени приближном вредношћу (1.68) $\varepsilon_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = SIa^2 k^2$, сумирање замени интеграцијом и уведе смена: $SIa^2 k^2 \theta^{-1} = x$, после које за мале θ горња граница интеграла постаје бесконачна, долази се до следећег закона промене магнетизације са температуром:

$$\sigma = 1 - S^{-1} \xi_{3/2} \tau^{3/2}; \quad \tau = \frac{\theta}{4\pi SI}; \quad \xi_{3/2} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^{3/2}}. \quad (1.71)$$

1.4. Фероелектрична побуђења

Фероелектрици или сењетоелектрици су кристали који поседују спонтану електричну поларизацију (они су поларизовани и без присуства спољашњег електричног поља). Први познати представник фероелектрика је кристал калијумдихидрофосфата KH_2PO_4 и особинама овог кристала посвећено је највише, како експерименталних тако и теоријских радова [9]. Касније је пронађен низ материјала који поседују фероелектричне особине и може се рећи да изучавање фероелектричних материјала данас представља једну од најразвијенијих области физике чврстог стања.

Фероелектрици се могу поделети у две групе и то фероелектрике типа уређено-неуређено и фероелектрике померајног типа [10]. Први тип фероелектрика има извесне сличности са магнетним материјалима, док се код другог типа појаве објашњавају осциловањем тешких јона, па се са формално-математичке тачке гледишта овакви фероелектрици испитују методима теорије фонона. У даљем ћемо се задржати само на фероелектрицима типа уређено-неуређено, чији је типични представник KH_2PO_4 .

На бази обимног експерименталног материјала [9] дошло се до закључка да је за фероелектричне особине KH_2PO_4 одговорно понашање протона у О–Н–О бондовима. Са развојем теорије и експеримента, касније је констатовано да у другим типовима фероелектрика постоје N–Н–N или C–Н–C мостови и да понашање протона у оваквим мостовима такође одређује фероелектрично понашање оваквих материјала.

Први теоријски модели који су и до данас задржани уз извесну модификацију, заснивали су се на идеји да између два кисеоника постоји симетрична потенцијална јама са двоструким дном у којој протон H^+ може да тунелује из једне позиције у другу [11], [12]. Основно стање овог система дефинише се тако што се сматра да су сви протони у бондовима лоцирани у истом делу двоструке потенцијалне јаме. Побуђења настају када услед додате спољашње енергије протони тунелују у супротни део потенцијалне јаме и када почне да се нарушава пуна уређеност којом је дефинисано основно стање. Настанак колективног побуђења у фероелектрику шематски се представља слично као настанак колективних побуђења у феромагнетицима (магнони или спински таласи) или као настанак екситона. Квант спољашње енергије (најчешће топлотни квант) пребаци у једном бонду протон из једног дела потенцијалне јаме у други и на тај начин се овај бонд ексцитира. Услед интеракције између бондова процес тунеловања протона преноси се и на остале бондове и тако се ствара талас побуђења који носи печат целог колективна молекула, јер му особине зависе како од особина индивидуалног бонда тако и од интеракција између бондова. Овакве колективне ексцитације кристала ћемо називати фероелектричним побуђењима. Са порастом температуре расте број топлотних кваната, па и фероелектричних побуђења које они стварају. Пошто, према напред датој слици, фероелектрично побуђивање представља нарушавање уређености која постоји у основном стању; то значи да се са порастом температуре фероелектрик „разуређује“ и да му се

спонтана електрична поларизација смањује. На некој температури T_C фероелектрик (статистички посматрано) постаје потпуно разуређен (половина протона у левом крају јаме, а друга половина у десном) и тада спонтана електрична поларизација постаје једнака нули. Температура T_C на којој се то догађа је температура фазног прелаза, а интервал температуре $(0, T_C)$ носи назив фероелектрична фаза. На температурима вишим од T_C спонтана поларизација је једнака нули и ова област температуре назива се параелектрична фаза. У параелектричној фази може да се појави електрична поларизација, али само онда ако се укључи неко спољашње електрично поље. Описана слика понашања фероелектрика веома је слична одговарајућој слици за Хајзенбергов феромагнетик [8], па је разумљиво да се у формулисању модела фероелектрика стартовало од идеје квази-спина. Два могућа положаја протона у O-H-O бонду потпуно су аналогна двема могућим оријентацијама спина $S = \frac{1}{2}$ у

Хајзенберговом феромагнетику. На основу ове аналогије формулисан је први моделни хамилтонијан за фероелектрике типа уређено-неуређено који носи назив Изингов модел у попречном пољу или скраћено IMTF-модел [13]. Хамилтонијан овог модела има облик:

$$\hat{H} = -2\Gamma \sum_{\vec{n}} S_{\vec{n}}^x - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} S_{\vec{n}}^z S_{\vec{m}}^z. \quad (1.72)$$

У овом изразу $S_{\vec{n}}^x$ и $S_{\vec{n}}^z$ су компонентне квази-спина, Γ представља енергију тунеловања протона, док су са $I_{\vec{n}\vec{m}}$ означене интеракције између бондова. Анализи величина Γ и $I_{\vec{n}\vec{m}}$ посвећен је велики број како теоријских [14]-[32], тако и експерименталних радова [33]-[36], али до данас не постоји довољно општи прорачун ових величине. Поуздано се зна да је однос $\frac{\Gamma}{I(0)}$; $I(0) = \sum_{\vec{m}} I_{0\vec{m}}$ реда величине 0,1 и да су матрични елементи интеракције између бондова реалне и симетричне величине ($I_{\vec{n}\vec{m}} = I_{\vec{m}\vec{n}} = I_{|\vec{n}-\vec{m}|}$; $I_{\vec{n}\vec{m}} = I_{\vec{n}\vec{m}}^*$). Карактер фазних прелаза указује на то да су и I и Γ позитивне величине.

Квази-спински оператори задовољавају исте комутационе релације као и спински-оператори тј.

$$[S_{\vec{n}}^x, S_{\vec{m}}^y] = iS_{\vec{n}}^z \delta_{\vec{n}\vec{m}}; \quad [S_{\vec{n}}^z, S_{\vec{m}}^x] = iS_{\vec{n}}^y \delta_{\vec{n}\vec{m}}; \quad [S_{\vec{n}}^y, S_{\vec{m}}^z] = iS_{\vec{n}}^x \delta_{\vec{n}\vec{m}}. \quad (1.73)$$

Ако се уведу квази-спински оператори: $S_{\vec{n}}^- = S_{\vec{n}}^x - iS_{\vec{n}}^y$ који „смањује“ z-пројекцију за јединицу, и $S_{\vec{n}}^+ = S_{\vec{n}}^x + iS_{\vec{n}}^y$, који „повећава“ z-пројекцију за јединицу, лако је констатовати на основу (1.73) да ови оператори задовољавају следећу релацију:

$$[S_{\vec{n}}^+, S_{\vec{m}}^-] = 2S_{\vec{n}}^z \delta_{\vec{n}\vec{m}}. \quad (1.74)$$

Пошто протон у бонду има само две могуће позиције очигледне су и следеће релације:

$$\left(S_{\vec{n}}^{-}\right)^2 = \left(S_{\vec{n}}^{+}\right)^2 = 0. \quad (1.75)$$

Такође је јасно да оператор $S_{\vec{n}}^z$ има само две својствене вредности и то $\pm \frac{1}{2}$.

На основу (1.75) се види да се оператори квази-спина S^+ и S^- могу заменити Паули-операторима:

$$S_{\vec{n}}^+ = P_{\vec{n}}; \quad S_{\vec{n}}^- = P_{\vec{n}}^+ \quad (1.76)$$

јер, за Паули-операторе важи $P_{\vec{n}}^2 = P_{\vec{n}}^{+2} = 0$.

Пошто су својствене вредности броја паулиона 0 и 1, а својствене вредности z -пројекције квази-спина $+\frac{1}{2}$ и $-\frac{1}{2}$, јасно је да се и z -пројекција може изразити преко Паули-оператора и то на следећи начин:

$$S_{\vec{n}}^z = \frac{1}{2} - P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}}^- . \quad (1.77)$$

Анализа фероелектрика се из разлога математичког комодитета не врши са хамилтонијаном (1.72), већ са одговарајућим унитарно трансформисаним хамилтонијаном. Унитарна трансформација на нове квази-спинске операторе има облик:

$$\begin{aligned} \sum_{\vec{n}} S_{\vec{n}}^z &= \sin \phi \sum_{\vec{n}} S_{\vec{n}}'^x - \cos \phi \sum_{\vec{n}} S_{\vec{n}}'^z \\ \sum_{\vec{n}} S_{\vec{n}}'^x &= \cos \phi \sum_{\vec{n}} S_{\vec{n}}'^x + \sin \phi \sum_{\vec{n}} S_{\vec{n}}'^z, \end{aligned} \quad (1.78)$$

где су S'^x и S'^z нови квази-спински оператори који задовољавају исте комутационе релације као и оператори S^x и S^z . Параметар ϕ се одређује из услова да у трансформисаном хамилтонијану исчезну чланови линеарни по $S_{\vec{n}}'^x$. На основу овога добија се:

$$\sin \phi = -\frac{4\Gamma}{I(0)}. \quad (1.79)$$

После трансформација (1.78) хамилтонијан (1.72) се може написати у облику:

$$\begin{aligned} \hat{H} = -\mathcal{N} \left[2\varepsilon\Gamma + \frac{1}{8}I(0) \right] &+ \frac{1}{2}I(0) \sum_{\vec{n}} \sigma_{\vec{n}}' - 2\varepsilon^2 \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} \left(S_{\vec{n}}' S_{\vec{m}}' + S_{\vec{m}}'^+ S_{\vec{n}}'^+ \right) - 4\varepsilon^2 \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} S_{\vec{n}}'^- S_{\vec{m}}'^+ - \\ &- \frac{1}{2} \left(1 - 16\varepsilon^2 \right) \sum_{\vec{n}\vec{m}} \sigma_{\vec{n}}' \sigma_{\vec{m}}' - 2\varepsilon \sqrt{1 - 16\varepsilon^2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} \left(S_{\vec{n}}'^- \sigma_{\vec{m}}' + \sigma_{\vec{m}}' S_{\vec{n}}'^+ \right), \end{aligned} \quad (1.80)$$

где је:

$$\sigma_{\vec{n}} = \frac{1}{2} - S_{\vec{n}}^z \quad (1.81)$$

и

$$\varepsilon = \frac{\Gamma}{I(0)} \sim 0,1. \quad (1.82)$$

Обично се анализе фероелектрика врше са хамилтонијаном (1.80). Овде ћемо користити нешто усавршени модел хамилтонијана (1.80) који је пре неколико година предложен [37], [38]. Ако се у хамилтонијану (1.80) пређе од спинских-оператора на Паули-операторе по правилима (1.76) и (1.77) може се приметити да се форме трећег реда по Паули-операторима множе коефицијентима реда I, па према томе ове форме дају у теорији пертурбације високе доприносе. Да би се избегли компликовани рачуни са формама трећег реда које дају доприносе тек у другом реду теорије пертурбација хамилтонијан (1.80), записан у Паули-операторима, унитарно је трансформисан на еквивалентни хамилтонијан \hat{H}_{eq} и то на следећи начин:

$$\hat{H}_{eq} = U \hat{H} U; U = e^{-(\hat{W} + \hat{V})}; \hat{W} = \sum_{\vec{a}\vec{b}} X_{\vec{a}\vec{b}} \left(P_{\vec{b}}^+ P_{\vec{b}}^- P_{\vec{a}} - P_{\vec{a}}^+ P_{\vec{b}}^+ P_{\vec{b}}^- \right); \hat{V} = Y \sum_{\vec{a}} \left(P_{\vec{a}}^+ - P_{\vec{a}}^- \right). \quad (1.83)$$

Параметри $X_{\vec{a}\vec{b}}$ и Y су одређени тако да из еквивалентног хамилтонијана исчезну форме трећег и првог реда по Паули-операторима. Са избором параметра $Y = 0$ и

$$I_{\vec{n}\vec{m}} X_{\vec{n}\vec{m}} - 2\varepsilon I_{\vec{n}\vec{m}} - \frac{1}{2} I(0) X_{\vec{n}\vec{m}} = 0 \quad (1.84)$$

елиминација форми трећег реда извршена је са тачношћу до квадрата малог параметра, ε , закључно.

Овим поступком хамилтонијан \hat{H}_{eq} се своди на следећи облик:

$$\hat{H}_{eq} = H_0 + H_{2d} + H_{2m} + H_{4d} \quad (1.85)$$

$$H_0 = -\mathcal{N}(0) \left(2\varepsilon^2 + \frac{1}{8} \right) \quad (1.86)$$

$$H_{2d} = \Delta \sum_{\vec{n}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}}^- \quad (1.87)$$

$$H_{2m} = \varepsilon I(0) \sum_{\vec{n}\vec{m}} X_{\vec{n}\vec{m}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}}^- \quad (1.88)$$

$$H_{4d} = - \sum_{\vec{n}\vec{m}} A_{\vec{n}\vec{m}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}}^- P_{\vec{m}}^+ P_{\vec{n}}^- . \quad (1.89)$$

У горњим формулама \mathcal{N} је укупан број бондова у кристалу, $X_{\bar{n}\bar{m}}$ се одређује из (1.84) док су Δ и $A_{\bar{n}\bar{m}}$ дати изразима:

$$\Delta = \frac{1}{2} I(0) [1 + 8\varepsilon^2 + 2\varepsilon X(0) + X^2(0)] \quad (1.90)$$

$$A_{\bar{n}\bar{m}} = \frac{1}{2} I_{\bar{n}\bar{m}} + 2\varepsilon I(0) X_{\bar{n}\bar{m}} + \frac{1}{2} I(0) \sum_{\bar{l}} X_{\bar{n}\bar{l}} X_{\bar{l}\bar{m}} + \sum_{\bar{l}} I_{\bar{n}\bar{l}} X_{\bar{m}\bar{l}} X_{\bar{n}\bar{l}} . \quad (1.91)$$

Ако се у релацији која одређује величине $X_{\bar{n}\bar{m}}$ тј. у једначини (1.84) изврше Фурије трансформације типа:

$$\psi_{\bar{l}} = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\bar{k}} \psi(\bar{k}) e^{i\bar{k}\bar{l}} \quad (1.92)$$

и искористи апроксимација најближих суседа, закључује се да су величине $X(\bar{k})$ дате изразом:

$$X(\bar{k}) = \sum_{\bar{l}} X_{\bar{l}} e^{-i\bar{k}\bar{l}} = -\frac{4\varepsilon}{d-1} \sum_{i=1}^d \cos k_i a , \quad (1.93)$$

где су k_i компоненте таласног вектора, a -константе решетке и $d = 1, 2, 3$ димензионост кристала. Види се да описани поступак, у коме је коришћена апроксимација најближих суседа, не може да се примени на једнодимензионе структуре, јер формула (1.93) постаје бесмислена за $d=1$.

Овде ћемо навести неке основне особине фероелектричних побуђења. При овоме ћемо апроксимативно узети да је:

$$\Delta = \frac{1}{2} I(0); \quad A_{\bar{n}\bar{m}} = \frac{1}{2} I_{\bar{n}\bar{m}} \quad (1.94)$$

док ћемо за величину X користити израз (1.93). При томе ћемо се ограничити на тродимензиони кристал. Овако упрошћен, хамилтонијан (1.85) има облик:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{1}{2} I(0) \sum_{\bar{n}} P_{\bar{n}}^+ P_{\bar{n}} - \frac{1}{2} \sum_{\bar{n}\bar{m}} \tilde{X}_{\bar{n}\bar{m}} P_{\bar{n}}^+ P_{\bar{n}} - \frac{1}{2} \sum_{\bar{n}\bar{m}} I_{\bar{n}\bar{m}} P_{\bar{n}}^+ P_{\bar{n}} P_{\bar{m}}^+ P_{\bar{m}} \\ \tilde{X}_{\bar{n}\bar{m}} &= 4 \frac{\Gamma^2}{I(0)} \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\bar{k}} e^{i\bar{k}(\bar{n}-\bar{m})} \sum_{i=1}^3 \cos k_i a . \end{aligned} \quad (1.95)$$

Да бисмо испитали особине фероелектричних побуђења користићемо се хармонијском апроксимацијом (апроксимација приближне друге квантizације) као и у теорији екситона. Значи хармонијски хамилтонијан фероелектрика има облик:

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2} I(0) \sum_{\bar{n}} B_{\bar{n}}^+ B_{\bar{n}} - \frac{1}{2} \sum_{\bar{n}\bar{m}} \tilde{X}_{\bar{n}\bar{m}} B_{\bar{n}}^+ B_{\bar{m}} \quad (1.96)$$

или, у простору таласних вектора:

$$H_0 = \sum_{\vec{k}} \frac{I(0) - \tilde{X}(\vec{k})}{2} B_{\vec{k}}^+ B_{\vec{k}}^- . \quad (1.97)$$

Закон дисперзије фероелектричних побуђења

$$E_F(\vec{k}) = \frac{1}{2} [I(0) - \tilde{X}(\vec{k})] \quad (1.98)$$

у апроксимацији најближих суседа и малих таласних вектора може се написати у облику:

$$E_F(\vec{k}) = 3(I - \tilde{X}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_F} \quad (1.99)$$

где је m_F ефективна маса фероелектричних побуђења и дата је изразом:

$$m_F = \frac{\hbar^2}{\tilde{X}a^2} . \quad (1.100)$$

Из експерименталних података се може закључити да су интеракције I реда величине $0,1\text{eV}$ док на основу формуле (1.95) и чињенице да је $\frac{\Gamma}{I_0} \sim 0,1$ следи да су

величине \tilde{X} реда $0,01\text{eV}$. На основу овога закључујемо да су фероелектрична побуђења на известан начин слична екситонима, јер им је праг енергије $3(I - \tilde{X})$ далеко већи од ширине зоне карактерисане величином \tilde{X} . Наравно, на скали енергије, фероелектрична побуђења леже за два до три реда величине испод екситона. С обзиром на наведене процене за \tilde{X} може се закључити да је ефективна маса фероелектричних побуђења за око два реда величине, већа од ефективне масе екситона пошто је \tilde{X} позитивно, фероелектрична побуђења имају само позитивну дисперзију, односно ефективна маса им је увак позитивна, што код екситона није случај.

1.5. Специфична топлота електронског гаса

Ферми-Диракова расподела

$$\langle \hat{N}_F \rangle_k = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon_k - \mu}{\theta}} + 1}$$

може се искористити за анализу термодинамичких особина система слободних електрона на ниским температурама. У стању са датим импулсом могу се наћи највише два електрона (спин може имати две вредности $S = \pm \frac{1}{2}$), па је енергија система слободних електрона одређена изразом [5]:

$$U_F = 2 \sum_k \varepsilon_k \langle \hat{N}_F \rangle_k = \frac{2V}{h^3} \int d^3 p \frac{p^2}{2m} \left(e^{\frac{p^2 - \mu}{2m\theta}} + 1 \right)^{-1} = \frac{4\pi V}{mh^3} \int_0^\infty \frac{p^4 dp}{e^{\frac{p^2 - \mu}{2m\theta}} + 1}. \quad (1.101)$$

Заменивши у претходној релацији $\frac{p^2}{2m} = \varepsilon$ и после тога извршивши парцијалну интеграцију, добија се:

$$U_F = \frac{8\pi V}{5h^3} (2m)^{\frac{3}{2}} \theta^{-1} \int_0^\infty d\varepsilon \varepsilon^{\frac{5}{2}} e^{\frac{\varepsilon - \mu}{\theta}} \left(e^{\frac{\varepsilon - \mu}{\theta}} + 1 \right)^{-1}. \quad (1.102)$$

Доња граница интеграла, после увођења смене $\frac{\varepsilon - \mu}{\theta} = x$, једнака је $-\frac{\mu}{\theta}$, и због претпоставке о ниској температури, тежи у $-\infty$. Такође, функција $e^x(e^x+1)^{-2}$, која се појављује у интегралу после смене, је парна. То значи, да после указане апроксимације израз за унутрашњу енергију гаса слободних електрона гласи:

$$U_F = \frac{8\pi V}{5h^3} (2m)^{\frac{3}{2}} \int_{-\infty}^\infty dx \frac{(\mu + \theta x)^{5/2} e^x}{(e^x + 1)^2}. \quad (1.103)$$

Пошто су температуре по претпоставци ниске, функција $(\mu + \theta x)^{5/2}$ се може развити у ред:

$$(\mu + \theta x)^{5/2} \approx \mu^{5/2} + \frac{5}{2}\mu^{3/2}\theta x + \frac{15}{8}\mu^{1/2}\theta^2 x^2. \quad (1.104)$$

После замене (1.104) у (1.103) налази се коначно:

$$U_F = \frac{V}{h^3} \left[\frac{8\pi(2m)^{3/2}}{5} J_0 \mu^{5/2} + 3\pi\mu^{1/2}(2m)^{3/2} J_2 \theta^2 \right]; \quad J_{2n} = \int_{-\infty}^\infty dx \frac{x^{2n} e^x}{(e^x + 1)^2}. \quad (1.105)$$

Специфична топлота се добија диференцирањем унутрашње енергије по температури, па је:

$$C_V = \frac{\partial U}{\partial \theta} = 6\pi\mu^{1/2}(2m)^{3/2} V h^{-3} J_2 \theta. \quad (1.106)$$

Према томе, специфична топлота гаса слободних електрона је на ниским температурама пропорционална првом степену температуре.

1.6. БЦС теорија суперпроводљивости

Богољубовљева теорија течног H_e^4 [39] одиграла је пресудну улогу у решавању проблема суперпроводљивости. Одмах се дошло на идеју да објашњење појаве суперпроводљивости треба тражити у ефектима Бозе-кондензације. Овде се одмах поставило питање на који начин у систему електрона може да наступи Бозе-кондензација. Електрони су Ферми-честице, тако да Паулијев принцип не дозвољава сакупљање електрона на једном енергетском нивоу. Одговор је брзо нађен: не кондензују се електрони већ парови електрона који имају супротне спинове. Овакви комплекси, који имају нулти спин, могу да се понашају као Бозе-честице и да формирају кондензат. Енергију везе оваквог пара и остале његове особине анализирао је Купер, па се отуда електронски парови са супротно усмереним спиновима називају Куперовим паровима. Увођење појма Куперовог пара дало је могућност да се размишља о Бозе-кондензацији у електронском гасу, али је остало нерешено питање механизма који нагони електроне да се везују у парове. Електрони се као истоимена наелектрисања одбијају кулоновским силама, па није било јасно на који се начин они могу зближити до таквих растојања на којима би почеле да делују привлачне изменске силе, које их везују у пар. Овај веома важан проблем решио је Фрелих [40]. Он је приметио да су метали утолико бољи суперпроводници уколико им је специфични отпор у нормалној фази већи, па је дошао на идеју да електрон-фонон интеракција, која је иначе узрокник појаве електричног отпора у нормалној фази, може под извесним условима да преузме обрнуту улогу и да стимулише појаву суперпроводљивости. Разрађујући ову идеју он је показао да на ниским температурама механизам електрон-фонон интеракције може да изазове привлачне силе између електрона и тиме омогући њихово везивање у парове.

Да би се изложила Фрелихова теорија настанка привлачних сила између електрона, потребно је, пре свега, формулисати хамилтонијан електрон-фонон интеракције. То се може постићи на тај начин што се хамилтонијан електронског система:

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}} \varepsilon(\vec{k}) a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} \quad (1.107)$$

Фурије-трансформацијама:

$$a_{\vec{k}} = N^{-\frac{1}{2}} \sum_{\vec{n}} a_{\vec{n}} e^{-i\vec{k}\vec{n}}; \quad a_{\vec{k}}^\dagger = N^{-\frac{1}{2}} \sum_{\vec{n}} a_{\vec{n}}^\dagger e^{i\vec{k}\vec{n}} \quad (1.108)$$

преведе у конфигурациони простор:

$$\hat{H} = \sum_{\vec{n}} \varepsilon_1 a_{\vec{n}}^\dagger a_{\vec{n}} + \sum_{\vec{n}\vec{m}} \varepsilon_2 (\vec{n} - \vec{m}) a_{\vec{n}}^\dagger a_{\vec{m}}; \quad \varepsilon_1 = N^{-1} \sum_{\vec{k}} \varepsilon(\vec{k}); \quad \varepsilon_2 (\vec{n} - \vec{m}) = N^{-1} \sum_{\vec{k}} \varepsilon(\vec{k})^{-i\vec{k}(\vec{n} - \vec{m})}. \quad (1.109)$$

Овај хамилтонијан одговара „замрзнутом“ кристалу. Због осциловања атома решетке свако \vec{n} добија прираштај $\tilde{\xi}(\vec{n})$, тако да се може писати:

$$\varepsilon_2(\vec{n} - \vec{m}) \rightarrow \varepsilon_2 \left\{ (\vec{n} - \vec{m}) + [\tilde{\xi}(\vec{n}) - \tilde{\xi}(\vec{m})] \right\} \approx \varepsilon_2(\vec{n} - \vec{m}) + [\tilde{\xi}(\vec{n}) - \tilde{\xi}(\vec{m})] \nabla_{\vec{n} - \vec{m}} \varepsilon_2(\vec{n} - \vec{m}). \quad (1.110)$$

Последњи резултат добијен је уз претпоставку да су атомски помераји мали. На ниским температурама оваква претпоставка је оправдана. На основу (1.110), хамилтонијан електрон-фонон интеракције може се написати у облику:

$$\hat{H}_{\text{int}} = \sum_{\vec{n}\vec{m}} [\tilde{\xi}(\vec{n}) - \tilde{\xi}(\vec{m})] \nabla_{\vec{n} - \vec{m}} \varepsilon_2(\vec{n} - \vec{m}). \quad (1.111)$$

Ако се атомски помераји изразе преко фононских оператора (1.18), искористи формула (1.109) и узму Фурије-трансформације електронских оператора које су инверзне трансформацијама (1.108), хамилтонијан интеракције (1.111) постаје:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{int}} &= N^{-\frac{1}{2}} \sum_{\vec{k}\vec{q}} F_{\vec{k},\vec{q}} a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}-\vec{q}} (b_{\vec{q}} + b_{-\vec{q}}^+); \\ F_{\vec{k},\vec{q}} &= -i \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega(\vec{q})}} [(\vec{q} - \vec{k}) \vec{l}(\vec{q}) \varepsilon_2(\vec{q} - \vec{k}) + \vec{k} \vec{l}(\vec{q}) \varepsilon_2(\vec{k})]; \quad F_{\vec{k}-\vec{q},-\vec{q}}^* = F_{\vec{k},\vec{q}}. \end{aligned} \quad (1.112)$$

Пошто је формиран хамилтонијан електрон-фонон интеракције, комплетан хамилтонијан система који садржи електроне, механичке осцилације и њихову узајамну интеракцију може се написати у облику:

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}} X_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k}} Y_{\vec{k}} b_{\vec{k}}^+ b_{\vec{k}} + N^{-\frac{1}{2}} \sum_{\vec{k}\vec{q}} F_{\vec{k},\vec{q}} a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}-\vec{q}} (b_{\vec{q}} + b_{-\vec{q}}^+). \quad (1.113)$$

У горњој формули $X_{\vec{k}}$ је енергија електрона која се „очитава“ од енергије Ферми-сфере:

$$X_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}, \quad (1.114)$$

док је $Y_{\vec{k}}$ енергија фонона:

$$Y_{\vec{k}} = \hbar\omega(\vec{k}) = \hbar\nu k. \quad (1.115)$$

Руковођен идејом да електрон-фонон интеракција може да изазове привлачне силе између електрона, Фрелих је извршио унитарну трансформацију хамилтонијана (1.113) са циљем да електрон-фонон интеракцију замени неком еквивалентном електрон-електрон интеракцијом. У општем случају унитарна трансформација се може реализовати помоћу антиермитског оператора \hat{S} :

$$\hat{S}^+ = -\hat{S}$$

и то на следећи начин:

$$\hat{H}_{eq} = e^{-\hat{S}} \hat{H} e^{\hat{S}}. \quad (1.116)$$

Израз (1.116) се може развити у операторски ред коришћењем Вајловог идентитета:

$$\hat{H}_{eq} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} [\hat{S}, [\hat{S}, [\dots [\hat{S}, \hat{H}]]]] \dots . \quad (1.117)$$

n -пута

Вајлов идентитет се добија на основу развоја у Маклоренов ред функције:

$$f(\varepsilon) = e^{\varepsilon \hat{S}} \hat{H} e^{-\varepsilon \hat{S}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\varepsilon^n}{n!} f^{(n)}(\varepsilon). \quad (1.118)$$

Пошто

$$\begin{aligned} f'(\varepsilon) &= e^{\varepsilon \hat{S}} \hat{S} \hat{H} e^{-\varepsilon \hat{S}} - e^{\varepsilon \hat{S}} \hat{H} \hat{S} e^{-\varepsilon \hat{S}} = e^{\varepsilon \hat{S}} [\hat{S}, \hat{H}] e^{-\varepsilon \hat{S}} \\ f''(\varepsilon) &= e^{\varepsilon \hat{S}} [\hat{S}, [\hat{S}, \hat{H}]] e^{-\varepsilon \hat{S}} \end{aligned} \quad (1.119)$$

је:

$$f^{(n)}(\varepsilon) = e^{\varepsilon \hat{S}} [\hat{S}, [\hat{S}, [\dots [\hat{S}, \hat{H}]]]] e^{-\varepsilon \hat{S}}$$

n -пута

заменом (1.119) у (1.118), за $\varepsilon = -1$ добија се (1.117). Фрелих се одлучио за апроксимацију:

$$\hat{H}_{eq} = \hat{H} - [\hat{S}, \hat{H}] + \frac{1}{2} [\hat{S}, [\hat{S}, \hat{H}]] \quad (1.120)$$

и оператор \hat{S} одабрао у облику:

$$\hat{S} = \hat{S}_1 - \hat{S}_1^+; \quad \hat{S}_1 = \sum_{\bar{\alpha} \bar{\beta}} \lambda_{\bar{\alpha} \bar{\beta}} a_{\bar{\alpha}}^+ a_{\bar{\alpha} - \bar{\beta}} b_{\bar{\beta}}; \quad [\hat{S}, \hat{H}] = [\hat{S}_1, \hat{H}] + [\hat{S}_1, \hat{H}]^\dagger \quad (1.121)$$

са циљем да произвољну функцију $\lambda_{\bar{\alpha} \bar{\beta}}$ одреди тако да из еквивалентног хамилтонијана елиминише део који је линеаран по фононским операторима. После налађења комутатора и занемаривања чланова пропорционалних $a^+ a$ $b^+ b$ еквивалентни хамилтонијан постаје:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{eq} &= \sum_{\bar{k}} X_{\bar{k}} a_{\bar{k}}^+ a_{\bar{k}} + \sum_{\bar{k}} Y_{\bar{k}} b_{\bar{k}}^+ b_{\bar{k}} + N^{-\frac{1}{2}} \sum_{\bar{k} \bar{q}} F_{\bar{k}, \bar{q}} a_{\bar{k}}^+ a_{\bar{k} - \bar{q}} (b_{\bar{q}} + b_{-\bar{q}}^+) - \\ &- \sum_{\bar{k} \bar{q}} \lambda_{\bar{k}, \bar{q}} (X_{\bar{k} - \bar{q}} - X_{\bar{k}} + Y_{\bar{q}}) a_{\bar{k}}^+ a_{\bar{k} - \bar{q}} b_{\bar{q}} - \sum_{\bar{k} \bar{q}} \lambda_{\bar{k} - \bar{q}, -\bar{q}}^* (X_{\bar{k}} - X_{\bar{k} - \bar{q}} + Y_{\bar{q}}) a_{\bar{k}}^+ a_{\bar{k} - \bar{q}} b_{-\bar{q}}^+ - \\ &- N^{-\frac{1}{2}} \sum_{\bar{k}_1 \bar{k}_2 \bar{k}_3} \left\{ \lambda_{\bar{k}_1, \bar{k}_1 - \bar{k}_3} F_{\bar{k}_2, \bar{k}_3 - \bar{k}_1} + \lambda_{\bar{k}_1 + \bar{k}_2 - \bar{k}_3, \bar{k}_1 - \bar{k}_3}^* F_{\bar{k}_3, \bar{k}_3 - \bar{k}_1}^* - \right. \\ &- \frac{1}{2} N^{-\frac{1}{2}} \lambda_{\bar{k}_1, \bar{k}_1 - \bar{k}_3} \lambda_{\bar{k}_1 + \bar{k}_2 - \bar{k}_3, \bar{k}_1 - \bar{k}_3}^* (X_{\bar{k}_2} - X_{\bar{k}_1 + \bar{k}_2 - \bar{k}_3} + Y_{\bar{k}_1 - \bar{k}_3}) - \\ &\left. - \frac{1}{2} N^{\frac{1}{2}} \lambda_{\bar{k}_1, \bar{k}_1 - \bar{k}_3} \lambda_{\bar{k}_1 + \bar{k}_2 - \bar{k}_3, \bar{k}_1 - \bar{k}_3}^* (X_{\bar{k}_3} - X_{\bar{k}_1} + Y_{\bar{k}_1 - \bar{k}_3}) \right\}. \end{aligned} \quad (1.122)$$

Ако се узме:

$$\lambda_{\vec{k}, \vec{q}} = N^{-\frac{1}{2}} \frac{F_{\vec{k}, \vec{q}}}{X_{\vec{k}-\vec{q}} - X_{\vec{k}} + Y_{\vec{q}}}, \text{ тј. } \lambda_{\vec{k}-\vec{q}, -\vec{q}}^* = \frac{F_{\vec{k}, \vec{q}}}{X_{\vec{k}} - X_{\vec{k}-\vec{q}} + Y_{\vec{q}}} \quad (1.123)$$

и добијени резултат усредњи по фононском вакууму, тј. у рачуну се узму у обзир само ефекти спонтане емисије фонона, долази се до следећег ефективног хамилтонијана:

$$\hat{H}_{\text{eff}} = \langle O_\phi | \hat{H}_{eq} | O_\phi \rangle = \sum_{\vec{k}} X_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} - N^{-1} \sum_{\vec{k}_1 \vec{k}_2 \vec{k}_3} \phi_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3} a_{\vec{k}_1}^\dagger a_{\vec{k}_2}^\dagger a_{\vec{k}_3} a_{\vec{k}_1 + \vec{k}_2 - \vec{k}_3} \quad (1.124)$$

$$\text{где је: } \phi_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3} = \frac{F_{\vec{k}_1, \vec{k}_2 - \vec{k}_3} F_{\vec{k}_2, \vec{k}_3 - \vec{k}_1}^{-2^{-1}} F_{\vec{k}_1, \vec{k}_1 - \vec{k}_3} F_{\vec{k}_1 + \vec{k}_2 - \vec{k}_3, \vec{k}_1 - \vec{k}_3}^*}{X_{\vec{k}_3} - X_{\vec{k}_1} + Y_{\vec{k}_1 - \vec{k}_3}} + \\ + \frac{F_{\vec{k}_1 + \vec{k}_2 - \vec{k}_3, \vec{k}_1 - \vec{k}_3}^* F_{\vec{k}_3, \vec{k}_3 - \vec{k}_1}^{-2^{-1}} F_{\vec{k}_1, \vec{k}_1 - \vec{k}_3} F_{\vec{k}_1 + \vec{k}_2 - \vec{k}_3, \vec{k}_1 - \vec{k}_3}^*}{X_{\vec{k}_2} - X_{\vec{k}_1 + \vec{k}_2 - \vec{k}_3} + Y_{\vec{k}_1 - \vec{k}_3}}. \quad (1.125)$$

Резултат Фрелихове трансформације је замена електрон-фонон интеракције у оригиналном хамилтонијану, електрон-електрон интеракцијом у еквивалентном хамилтонијану. Даља анализа се састоји у испитивању услова под којима ефективна електрон-електрон интеракција постаје привлачна. У том циљу се из (1.124) издваја део који одговара процесима између електрона који имају супротне импулсе:

$$\vec{k}_1 = \vec{k}; \quad \vec{k}_2 = -\vec{k}; \quad \vec{k}_3 = -\vec{q}; \quad \vec{k}_1 + \vec{k}_2 - \vec{k}_3 = \vec{q} \quad (1.126)$$

Осим тога функцију $(\vec{q} - \vec{k})\bar{l}(\vec{q})\varepsilon_2(\vec{q} - \vec{k}) + \vec{k}\bar{l}(\vec{q})\varepsilon_2(\vec{k})$ која фигурише у изразу (1.112) за $F_{\vec{k}, \vec{q}}$ замењује њеном средњом квадратном вредношћу:

$$\psi = \left\{ N^{\frac{1}{2}} \sum_{\vec{k}\vec{q}} [(\vec{q} - \vec{k})\bar{l}(\vec{q})\varepsilon_2(\vec{q} - \vec{k}) + \vec{k}\bar{l}(\vec{q})\varepsilon_2(\vec{k})]^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (1.127)$$

тако да је:

$$F_{\vec{k}, \vec{q}} = -i\psi \sqrt{\frac{\hbar}{2Mvq}} \quad (1.128)$$

и зависи само од другог индекса. За супротне импулсе и $F_{\vec{k}, \vec{q}}$ које зависи само од другог индекса функција $\phi_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3}$ постаје:

$$\phi_{\vec{k}, \vec{q}} = \frac{|F_{\vec{k} + \vec{q}}|^2 Y_{\vec{k} + \vec{q}}}{(X_{\vec{k}} - X_{\vec{q}})^2 - Y_{\vec{k} + \vec{q}}^2}; \quad |F_{\vec{k} + \vec{q}}|^2 = \frac{\hbar\psi^2}{2Mvq} \quad (1.129)$$

тако да је издвојени део хамилтонијана (1.124):

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}} X_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}} - N^{-1} \sum_{\vec{k}\vec{q}} \frac{|F_{\vec{k}+\vec{q}}|^2 Y_{\vec{k}+\vec{q}}}{(X_{\vec{k}} - X_{\vec{q}})^2 - Y_{\vec{k}+\vec{q}}^2} a_{\vec{k}}^+ a_{-\vec{k}}^+ a_{-\vec{q}} a_{\vec{q}} . \quad (1.130)$$

На основу овог Фрелиховог резултата Бардин, Купер и Шрифер [41] су дали моделни хамилтонијан електронског система који би требало да објасни феномен суперпроводљивости. Они су увели у рачун и електронске спинове и ограничили се само на електроне са супротним спиновима и супротним импулсима. Њихов моделни хамилтонијан има облик:

$$H_{BCS} = \sum_{\vec{k}} X_{\vec{k}} \left[a_{\vec{k}}^+ \left(\frac{1}{2} \right) a_{\vec{k}} \left(\frac{1}{2} \right) + a_{-\vec{k}}^+ \left(-\frac{1}{2} \right) a_{-\vec{k}} \left(\frac{1}{2} \right) \right] - \frac{1}{2N} \sum_{\vec{k}\vec{q}} W_{\vec{k},\vec{q}} a_{\vec{k}}^+ \left(\frac{1}{2} \right) a_{-\vec{k}}^+ \left(-\frac{1}{2} \right) a_{-\vec{q}} \left(-\frac{1}{2} \right) a_{\vec{q}} \left(\frac{1}{2} \right) \quad (1.131)$$

где је функција $W_{\vec{k},\vec{q}}$ дефинисана на следећи начин:

$$W_{\vec{k},\vec{q}} = \begin{cases} W > 0 & \text{за } K_F - K_G \leq k, q \leq K_F + K_G \\ 0 & \text{ван овог интервала} \end{cases} \quad (1.132)$$

$$K_G \ll K_0 \sim 10^6 \text{ cm}^{-1}$$

У хамилтонијану БЦС-модела може се извршити следећа канонична трансформација Ферми-оператора a^+ и a :

$$\begin{aligned} a_{\vec{k}} \left(\frac{1}{2} \right) &= u_{\vec{k}} \alpha_{\vec{k}}(1) + v_{\vec{k}} \alpha_{\vec{k}}^+(2); & a_{\vec{k}}^+ \left(\frac{1}{2} \right) &= u_{\vec{k}} \alpha_{\vec{k}}^+(1) + v_{\vec{k}} \alpha_{\vec{k}}(2) \\ a_{-\vec{k}} \left(-\frac{1}{2} \right) &= u_{\vec{k}} \alpha_{\vec{k}}(2) - v_{\vec{k}} \alpha_{\vec{k}}^+(1); & a_{-\vec{k}}^+ \left(-\frac{1}{2} \right) &= u_{\vec{k}} \alpha_{\vec{k}}^+(2) - v_{\vec{k}} \alpha_{\vec{k}}(1). \end{aligned} \quad (1.133)$$

Реалне и парне функције $u_{\vec{k}}$ и $v_{\vec{k}}$ задовољавају услов:

$$u_{\vec{k}}^2 + v_{\vec{k}}^2 = 1 \quad (1.134)$$

који се добија из захтева да оператори α^+ и α буду такође Ферми-оператори. На пример:

$$\begin{aligned} 1 &= \left\{ a_{\vec{k}}^+ \left(\frac{1}{2} \right), a_{\vec{k}}^+ \left(\frac{1}{2} \right) \right\} = u_{\vec{k}}^2 \left\{ \alpha_{\vec{k}}^+(1), \alpha_{\vec{k}}^+(1) \right\} + v_{\vec{k}}^2 \left\{ \alpha_{\vec{k}}^+(2), \alpha_{\vec{k}}^+(1) \right\} + \\ &+ u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} \left\{ \alpha_{\vec{k}}^+(1), \alpha_{\vec{k}}^+(2) \right\} + u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} \left\{ \alpha_{\vec{k}}^+(2), \alpha_{\vec{k}}^+(1) \right\} = u_{\vec{k}}^2 + v_{\vec{k}}^2 = 1. \end{aligned} \quad (1.135)$$

Ако се (1.133) замени у (1.131) и искористи (1.132) онда се хамилтонијан БЦС-модела своди на:

$$\begin{aligned}\hat{H}_{BCS} &= \sum_{\vec{k}} \left(2X_{\vec{k}} v_{\vec{k}}^2 - \Delta u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} \right) + \sum_{\vec{k}} \left[X_{\vec{k}} \left(u_{\vec{k}}^2 - v_{\vec{k}}^2 \right) + 2\Delta u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} \right] \left[\alpha_{\vec{k}}^+(1)\alpha_{\vec{k}}^-(1) + \alpha_{\vec{k}}^+(2)\alpha_{\vec{k}}^-(2) \right] + \\ &+ \sum_{\vec{k}} \left[2X_{\vec{k}} u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} - \Delta \left(u_{\vec{k}}^2 - v_{\vec{k}}^2 \right) \right] \left[\alpha_{\vec{k}}^+(1)\alpha_{\vec{k}}^+(2) + \alpha_{\vec{k}}^-(2)\alpha_{\vec{k}}^-(1) \right] \\ &= \frac{W}{2N} \sum_{\vec{q}} u_{\vec{k}} v_{\vec{k}}\end{aligned}\quad (1.136)$$

Треба напоменути да је (1.136) добијено из (1.131) тако што су занемарене све форме четвртог реда по операторима α^+ и α . Стабилизација хамилтонијана (1.136) захтева елиминацију чланова пропорционалних $\alpha^+ \alpha^+$ и $\alpha \alpha$. Ово се постиже тако што се коефицијенти уз овакве операторске продукте изједначе са нулом:

$$2X_{\vec{k}} u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} - \Delta \left(u_{\vec{k}}^2 - v_{\vec{k}}^2 \right) = 0. \quad (1.137)$$

Ако се узме у обзир да је $u_{\vec{k}}^2 + v_{\vec{k}}^2 = 1$ долази се до следећег резултата:

$$u_{\vec{k}}^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{X_{\vec{k}}}{\sqrt{X_{\vec{k}}^2 + \Delta^2}} \right); \quad v_{\vec{k}}^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{X_{\vec{k}}}{\sqrt{X_{\vec{k}}^2 + \Delta^2}} \right); \quad u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} = \frac{1}{2} \frac{\Delta}{\sqrt{X_{\vec{k}}^2 + \Delta^2}}. \quad (1.138)$$

На основу овога, хамилтонијан (1.136) постаје:

$$\hat{H}_{BCS} = \sum_{\vec{k}} \left[X_{\vec{k}} - \frac{X_{\vec{k}}^2 + 2^{-1}\Delta^2}{\sqrt{X_{\vec{k}}^2 + \Delta^2}} \right] - \sum_{\vec{k}} \sqrt{X_{\vec{k}}^2 + \Delta^2} \left[\alpha_{\vec{k}}^+(1)\alpha_{\vec{k}}^-(1) + \alpha_{\vec{k}}^+(2)\alpha_{\vec{k}}^-(2) \right]. \quad (1.139)$$

Добијени израз за хамилтонијан БЦС-модела односи се само на уски слој импулса око граничног импулса K_F Ферми-сфере. Дебљина овог слоја износи $2K_G$, где је $K_G \sim 10^5 \text{ cm}^{-1}$. Поншто је $K_F \gg K_G$ израз за електронску енергију се може приближно узети у следећем облику:

$$\begin{aligned}X_{\vec{k}} &= \frac{\hbar^2}{2m} \left(K^2 - K_F^2 \right) = \frac{\hbar^2}{2m} (K + K_F)(K - K_F) \approx \frac{\hbar^2 K_F}{m} (K - K_F) = \frac{P_F}{m} (P - P_F). \quad (1.140) \\ K &\in [K_F - K_G, K_F + K_G]\end{aligned}$$

Ако се уведе променљива $v = P - P_F$, онда израз за енергију елементарних ексцитација постаје:

$$E_v = \sqrt{\Delta^2 + P_F^2 m^{-2} v^2}. \quad (1.141)$$

У непосредној близини границе Ферми-сфере је $v \approx 0$, па се може писати:

$$E_\nu \approx \Delta + \frac{P_F^2 v^2}{2m^2 \Delta}.$$

Ако се формира израз за фазну брзину:

$$v_\phi = \frac{E_\nu}{\nu} = \frac{\Delta}{\nu} + \frac{P_F^2}{2m^2 \Delta} \nu \quad (1.142)$$

онда он има минималну вредност:

$$\min v_\phi = \min \left(\frac{E_\nu}{\nu} \right)_\nu = \frac{m\Delta}{P_F} \sqrt{2} = \sqrt{2} \frac{P_F}{m}. \quad (1.143)$$

Пошто фазна брзина елементарних ексцитација које креирају оператори α^+ има позитиван минимум, услов за суперфлуидни трансфер електрона је испуњен и тиме се може објаснити нестанак електричног отпора на температурата које су нешто изнад апсолутне нуле. Оператори α^+ и α креирају и анихилирају Куперове парове, а до њихове кондензације, ако се о њој уопште може говорити, долази не у стању са нултим импулсом, већ у стању са импулсом $P=P_F$.

Из досадашњих разматрања види се да величина Δ игра битну улогу у процесу суперфлуидног трансфера електрона. Ако је овај праг енергије једнак нули, онда не важи (1.142) и у систему настаје електрични отпор. С обзиром на (1.136) и (1.138) величина Δ се одређује из услова:

$$1 = \frac{W}{4N} \sum_k \left(X_k^2 + \Delta^2 \right)^{-\frac{1}{2}}. \quad (1.144)$$

Одавде се види да услов (1.144) има смисла само ако је $W > 0$, тј. ако између електрона делују привлачне сile. Да би се добио експлицитни израз за Δ потребно је у (1.144) прећи од сумирања на интеграцију. С обзиром на (1.140), услов (1.144) се може писати на следећи начин:

$$\begin{aligned} 1 &= \frac{Wa^3}{8\pi^2 \hbar v_F} \int_{K_F - K_G}^{K_F + K_G} dK \frac{K^2}{\sqrt{(K - K_F)^2 + (\Delta \hbar^{-1} v_F)^2}} \approx \frac{Wa^3 K_F^2}{8\pi^2 \hbar v_F} \int_{-K_G}^{+K_G} \frac{dx}{\sqrt{x^2 + \frac{\Delta^2}{\hbar^2 v_F^2}}} = \\ &= \frac{Wa^3 K_F^2}{8\pi^2 \hbar v_F} \ln \frac{\sqrt{K_G^2 + \frac{\Delta^2}{\hbar^2 v_F^2}} + K_G}{\sqrt{K_G^2 + \frac{\Delta^2}{\hbar^2 v_F^2}} - K_G} \approx \frac{Wa^3 K_F^2}{8\pi^2 \hbar v_F} \ln \frac{4\hbar^2 v_F^2 K_G^2}{\Delta^2} \end{aligned} \quad (1.145)$$

$$v_F = \frac{P_F}{m}; \quad a^3 = \frac{V}{N}$$

па се за енергетски праг Δ добија израз:

$$\Delta = 2\hbar v_F K_G e^{-\frac{4\pi^2 \hbar v_F}{W a^3 K_F^2}} = 2 \frac{P_G P_F}{m} e^{-\frac{4\pi^2 \hbar^3}{W m P_F a^3}}. \quad (1.146)$$

Одавде је јасно да Δ расте са порастом константне интеракције W . Ако се узме $K_G \sim 10^4 \text{ cm}^{-1}$ и $K_F \sim 10^8 \text{ cm}^{-1}$, онда је Δ при веома великом W реда 0,001-0,01 eV. Ако се узму у обзир температурски ефекти, онда се испоставља да Δ опада са порастом температуре и да на некој критичној температури T_C постаје једнако нули. С обзиром на процењени ред величине за Δ , критичне температуре износе око 10-20K.

Пошто су могућности примене суперпроводника веома велике, данас се веома интензивно ради на конструкцији таквих материјала који би имали бар за ред величине вишу критичну температуру од горе наведене. Овакви материјали не би захтевали употребу гломазних и скупих хелијумских апаратура за хлађење.

2. ПОСЕБНЕ КАРАКТЕРИСТИКЕ ТАНКИХ ФИЛМОВА

2.1. Фонони у танким филмовима

Овде ће бити анализиране колективне механичке осцилације у филму који је изрезан из просте тетрагоналне бесконачне структуре са константама решетке a_x, a_y и a_z . Унапред се претпоставља да до нарушења трансляционе симетрије долази само у правцу једне осе (најчешће је то z -оса), тј. филм има релативно малу дебљину дуж z -правца. У XOY равнима нормалним на z -правац, филм ће бити третиран као идеална бесконачна структура, што значи да се у тим равнима трансляциона инваријантност одржава. Такође, ради упрощења рачуна ће бити претпостављено да су торзиони коефицијенти еластичности занемариви у односу на Хукове коефицијенте еластичности, тј.

$$C_{\alpha\beta,n_z} = C_{\alpha,n_z} \delta_{\alpha\beta}, \quad \alpha, \beta = (x, y, z). \quad (2.1)$$

Независно од типа деформације дуж z -правца, постаје јасно да сви важни физички параметри филма, између осталог маса, константе еластичности али и импулси и атомски помераји, постају зависни од решеткиног индекса n_z , тј.

$$M \rightarrow M_{n_z}, \quad C_\alpha \rightarrow C_{\alpha,n_z}, \quad n_z = 0, 1, 2, \dots, N_z.$$

Хармонијски хамилтонијан фононског система описаног филма у апроксимацији најближих суседа може бити написан на следећи начин [47]

$$H = H_S + H_B, \quad (2.2)$$

где је

$$\begin{aligned} H_S = & \frac{1}{4} \sum_{\alpha, n_x, n_y} \left\{ 2C_{\alpha,-1} u_{\alpha;n_x,n_y,0}^2 + 2C_{\alpha,N_z+1} u_{\alpha;n_x,n_y,N_z}^2 + \right. \\ & + C_{\alpha,0} \left[(u_{\alpha;n_x+1,n_y,0} - u_{\alpha;n_x,n_y,0})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,n_y,0} - u_{\alpha;n_x,n_y,0})^2 + \right. \\ & + (u_{\alpha;n_x,n_y+1,1} - u_{\alpha;n_x,n_y,0})^2 + (u_{\alpha;n_x,n_y-1,0} - u_{\alpha;n_x,n_y,0})^2 + \\ & + (u_{\alpha;n_x,n_y,1} - u_{\alpha;n_x,n_y,0})^2 \left. \right] + C_{\alpha,N_z} \left[(u_{\alpha;n_x+1,n_y,N_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,N_z})^2 + \right. \\ & + (u_{\alpha;n_x-1,n_y,N_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,N_z})^2 + (u_{\alpha;n_x,n_y+1,N_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,N_z})^2 + \\ & \left. + (u_{\alpha;n_x,n_y-1,N_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,N_z})^2 + (u_{\alpha;n_x,n_y,N_z-1} - u_{\alpha;n_x,n_y,N_z})^2 \right] \} \end{aligned} \quad (2.3)$$

И

$$\begin{aligned} H_B = & \frac{1}{2} \sum_{\alpha, n_x, n_y} \sum_{n_z=0}^{N_z} \frac{1}{M_{n_z}} p_{\alpha;n_x,n_y,n_z}^2 + \frac{1}{4} \sum_{\alpha, n_x, n_y} \sum_{n_z=1}^{N_z-1} C_{\alpha,n_z} \times \\ & \times \left[(u_{\alpha;n_x+1,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x+1,n_y,n_z})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,n_z})^2 + \right. \\ & + (u_{\alpha;n_x,n_y+1,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,n_z})^2 + (u_{\alpha;n_x,n_y-1,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,n_z})^2 + \\ & \left. + (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z+1} - u_{\alpha;n_x,n_y,n_z})^2 + (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z-1} - u_{\alpha;n_x,n_y,n_z})^2 \right], \end{aligned} \quad (2.4)$$

при чему H_S -садржи доприносе граничних слојева, а H_B -унутрашњости филма. У овим формулама u_α су пројекције атомског помака, $p_\alpha = M\dot{u}_\alpha$ су одговарајући импулси, M су масе атома и C_α су Хукове константе еластичности. Индекс $\alpha = x, y, z$ означава пројекцију на одговарајуће осе Декартовог система, док решеткини индекси n_x, n_y и n_z леже у интервалима:

$$n_\beta \in \begin{cases} \left[-\frac{N_\beta}{2} + 1, \frac{N_\beta}{2} \right], & N_\beta \text{ парно}, \\ \left[\frac{-N_\beta + 1}{2}, \frac{N_\beta - 1}{2} \right], & N_\beta \text{ непарно}, \end{cases} \quad \beta = x, y \quad (2.5)$$

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

Како су слојеви $n_z \leq -1$ и $n_z \geq N_z + 1$ одсутни, узето је да су одговарајући помаци једнаки нули, тј.

$$u_{\alpha; n_x, n_y, -1} = u_{\alpha; n_x, n_y, N_z + 1} = 0. \quad (2.6)$$

Претпоставимо да су промене маса и константи еластичности дате на следећи начин:

$$M_{n_z} = M + \mu_{n_z}, \quad (2.7)$$

$$C_{\alpha, n_z} = C_\alpha + \gamma_{n_z} \quad (2.8)$$

где је M -маса атома или молекула у неспатерованој матрици, а μ_{n_z} представља корекцију масе услед допирања.

Како се у анализи користи стационарни пертурбациони метод, јасно је да мора бити испуњен услов

$$\frac{|\mu_{n_z}|}{M} \ll 1. \quad (2.9)$$

У једначини (2.8) C_α -представља Хукову константу еластичности недеформисаног филма, док је γ_{n_z} корекција услед деформације. И у овом случају пертурбација мора бити мала, тј.

$$\frac{|\gamma_{n_z}|}{C_\alpha} \ll 1. \quad (2.10)$$

С друге стране, у хамилтонијан (2.2) улазе површинске Хукове константне, $C_{\alpha,-1}$ и C_{α,N_z+1} , јер се једино у том случају добијају резултати који су компатибилни са експерименталним чињеницама. За њих ћемо претпоставити да се разликују од одговарајућих у балку, додавањем произвољних константних коефицијената тзв. површинских параметара a и b који су у општем случају дати као

$$C_{\alpha,-1} = C_\alpha(1+a), \quad (2.11)$$

$$C_{\alpha,N_z+1} = C_\alpha(1+b). \quad (2.12)$$

На тај начин, мењањем ових параметара ми добијамо различите моделе граничних услова. С обзиром да у хамилтонијан система маса улази као $\frac{1}{M_{n_z}}$; тада на основу (2.7) можемо узети следеће:

$$\frac{1}{M_{n_z}} = \frac{1}{M + \mu_{n_z}} = \frac{1}{M} \frac{1}{1 + \frac{\mu_{n_z}}{M}} \approx \frac{1}{M} - \frac{\mu_{n_z}}{M^2}. \quad (2.13)$$

У складу са наведеним претпоставкама, хамилтонијан фононског система је облика:

$$H = H_0 + H_{int}, \quad (2.14)$$

где је

$$H_0 = H_{0S} + H_{0B} \quad (2.15)$$

и

$$H_{int} = H_{int}^S + H_{int}^B. \quad (2.16)$$

Да бисмо изоставили непотребна понављања у преписивању, рецимо да се хамилтонијан H_{0S} добија из (2.3) заменом C_{α,n_z} са C_α као и релација (2.11) и (2.12), а у H_{0B} заменом M_{n_z} и C_{α,n_z} у (2.4) са M и C_α . Хамилтонијан интеракције, H_{int} , односно H_{int}^S и H_{int}^B , се добијају ако се уместо C_{α,n_z} замени γ_{α,n_z} односно $M_{n_z}^{-1} \rightarrow -\mu_{n_z} M^{-2}$.

Да бисмо решили својствени проблем хамилтонијана H_0 , формираћемо једначине кретања за операторе $u_{\vec{n}}$ и $p_{\vec{n}}$ на следећи начин

$$i\hbar \dot{u}_{\vec{n}}^\alpha = [u_{\vec{n}}^\alpha, H_0], \quad i\hbar \dot{p}_{\vec{n}}^\alpha = [p_{\vec{n}}^\alpha, H_0], \quad \vec{n} \in (n_x, n_y, n_z). \quad (2.17)$$

Узимајући у обзир комутационе релације $[u_{\vec{n}}^\alpha, p_{\vec{m}}^\beta] = i\hbar \delta_{\vec{n}\vec{m}} \delta_{\alpha\beta}$, можемо ове две једначине (2.17) спојити у једну која садржи само помераје u .

На тај начин добијамо систем од $N_z + 1$ диференцијално-диференцних једначина:

$$\begin{cases} n_z = 0 \\ \ddot{u}_{\alpha; n_x, n_y, 0} - \Omega_\alpha^2 (u_{\alpha; n_x+1, n_y, 0} + u_{\alpha; n_x-1, n_y, 0} - u_{\alpha; n_x, n_y, 0} - u_{\alpha; n_x, n_y, 0} + u_{\alpha; n_x, n_y+1, 0} + \\ + u_{\alpha; n_x, n_y-1, 0} - 2u_{\alpha; n_x, n_y, 0} + u_{\alpha; n_x, n_y, 1} - 2(1+\alpha)u_{\alpha; n_x, n_y, 0}) = 0, \end{cases} \quad (2.18)$$

$$\begin{cases} 1 \leq n_z \leq N_z - 1 \\ \ddot{u}_{\alpha; n_x, n_y, n_z} - \Omega_\alpha^2 (u_{\alpha; n_x+1, n_y, n_z} + u_{\alpha; n_x-1, n_y, n_z} - 2u_{\alpha; n_x, n_y, n_z} + u_{\alpha; n_x, n_y+1, n_z} + \\ + u_{\alpha; n_x, n_y-1, n_z} - 2u_{\alpha; n_x, n_y, n_z} + u_{\alpha; n_x, n_y, n_z+1} + u_{\alpha; n_x, n_y, n_z-1} - 2u_{\alpha; n_x, n_y, n_z}) = 0, \end{cases} \quad (2.19)$$

$$\{n_z = N_z\}$$

$$\begin{cases} n_z = N_z \\ \ddot{u}_{\alpha; n_x, n_y, N_z} - \Omega_\alpha^2 (u_{\alpha; n_x+1, n_y, N_z} + u_{\alpha; n_x-1, n_y, N_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, N_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, N_z} + \\ + u_{\alpha; n_x, n_y+1, N_z} + u_{\alpha; n_x, n_y-1, N_z} - 2u_{\alpha; n_x, n_y, N_z} + u_{\alpha; n_x, n_y, N_z-1} - 2(1+b)u_{\alpha; n_x, n_y, N_z}) = 0, \end{cases} \quad (2.20)$$

где је

$$\Omega_\alpha^2 = \frac{C_\alpha}{M} \quad (2.21)$$

фононска фреквенција.

Трансациона инваријантност се одржава по свим XOY равним. То значи да ћемо решење система једначина (2.18) – (2.20) за атомске помераје тражити у облику суперпозиције производа непознате функције (дуж z -правца) и хармониске функције положаја (у XOY равни) [47], тј.

$$u_{\alpha; n_x, n_y, n_z}(t) = \sum_{k_x, k_y, k_z} S_{\alpha; k_x, k_y, \nu_z} \mathcal{A}_{\alpha; \nu_z, n_z} \times \left\{ b_{\alpha; k_x, k_y, \nu_z} e^{i(n_x a_x k_x + n_y a_y k_y) - it\omega_{\alpha; k_x, k_y, \nu_z}} + \right. \\ \left. + b_{\alpha; k_x, k_y, \nu_z}^+ e^{-i(n_x a_x k_x + n_y a_y k_y) + it\omega_{\alpha; k_x, k_y, \nu_z}} \right\}, \quad (2.22)$$

где је $S_{\alpha; k_x, k_y, \nu_z}$ - фактор нормирања, $\mathcal{A}_{\alpha; \nu_z, n_z}$ - су неодређене амплитуде које зависе од n_z , $b_{\alpha; k_x, k_y, \nu_z}^+$ и $b_{\alpha; k_x, k_y, \nu_z}$ - су фононски креациони и анихилациони оператори, $\omega_{\alpha; k_x, k_y, \nu_z}$ - су фононске фреквенције и

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

$$\nu_\beta \in \begin{cases} \left[-\frac{N_\beta}{2} + 1, \frac{N_\beta}{2} \right], & N_\beta \text{ парно}, \\ \left[\frac{-N_\beta - 1}{2}, \frac{N_\beta - 1}{2} \right], & N_\beta \text{ непарно}, \end{cases} \quad \beta = x, y \quad (2.23)$$

су компоненте таласног вектора у XOY равни које одговарају стањима слободних електрона у проводној зони.

Након супституције (2.22), систем једначина (2.18) – (2.20) се редукује у систем једначина за непознате амплитуде $(A_0, A_1, \dots, A_{N_z})$ дуж z -правца

$$A_{\alpha; \nu_z, 1} + (\rho_{\alpha; k_x, k_y, \nu_z} - a) A_{\alpha; \nu_z, 0} = 0, \quad n_z = 0, \quad (2.24)$$

$$A_{\alpha; \nu_z, n_z+1} + A_{\alpha; \nu_z, n_z-1} + \rho_{\alpha; k_x, k_y, \nu_z} A_{\alpha; \nu_z, n_z} = 0, \quad 1 \leq n_z \leq N_z - 1, \quad (2.25)$$

$$A_{\alpha; \nu_z, N_z-1} + (\rho_{\alpha; k_x, k_y, \nu_z} - b) A_{\alpha; \nu_z, N_z} = 0, \quad n_z = N_z, \quad (2.26)$$

где је

$$\rho_{\alpha; k_x, k_y, \nu_z} = \frac{\omega_{\alpha; k_x, k_y, \nu_z}^2}{\Omega_\alpha^2} - 4 \left[\sin^2 \left(\frac{a_x k_x}{2} \right) + \sin^2 \left(\frac{a_y k_y}{2} \right) \right] - 2. \quad (2.27)$$

Детерминанта система једначина (2.24) – (2.26) има облик:

$$\mathcal{D}_{N_z+1}(\rho, a, b) = \begin{vmatrix} (\rho - a) & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & \rho & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \rho & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \rho & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & \ddots & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \rho & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & \rho & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & \rho & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & (\rho - b) \end{vmatrix}. \quad (2.28)$$

Развојем горње детерминанте по првој и последњој врсти (колони) добија се следећа компактна форма

$$\mathcal{D}_{N_z+1}(\rho, a, b) = C_{N_z+1}(\rho) - (a+b)C_{N_z}(\rho) + abC_{N_z-1}(\rho), \quad (2.29)$$

где су $C_n(\rho)$ Чебишевљеви полиноми треће врсте (видети додатак) који задовољавају следећу диференцну једначину: $C_{n+1} + C_{n-1} = \rho C_n$, са почетним условима $C_0 = 1$ и $C_1 = \rho$.

Полазећи од чињенице да су корени полинома $\mathcal{D}_{N_z+1}(\rho, a, b)$ реални и једноструки, и да је њихов број једнак броју слојева у филму, њиховим одређива-

њем ми заправо добијамо осцилаторне енергије (закон дисперзије) у посматраном танком филму.

На основу (2.27) коначно можемо писати:

$$\omega_{\alpha;k_x,k_y,\nu_z} = 2\Omega_\alpha \sqrt{\sin^2\left(\frac{a_x k_x}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{a_y k_y}{2}\right) + \Delta_{\nu_z}^\alpha(a, b, N_z)}. \quad (2.30)$$

Израз (2.30) представља закон дисперзије фононског система у танком филму. Величина $\Delta_{\nu_z}^\alpha(a, b, N_z)$ у општем случају се добија из трансцендентне једначине која ће касније бити детаљно анализирана.

Најпре размотrimо случај када су параметри површинске деформације једнаки нули, тј. $a=b=0$. У том случају детермината (2.28) постаје уствари Чебишевљев полином треће врсте:

$$\mathcal{D}_{N_z+1}(\rho, 0, 0) \equiv C_{N_z+1}(\rho) = \begin{vmatrix} \rho & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & \rho & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \rho & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \rho & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & \ddots & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \rho & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & \rho & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & \rho & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & \rho \end{vmatrix}, \quad \rho = \rho_{\alpha;k_x,k_y,\nu_z}. \quad (2.31)$$

У случају када је $|\rho| < 2$, добијамо запреминска стања и горња детерминанта може бити записана у еквивалентној форми као:

$$\mathcal{D}_{N_z+1}(\rho, 0, 0) = C_{N_z+1}(\rho) = \frac{\sin[(N_z+2)\xi]}{\sin \xi}, \quad (2.32)$$

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

Из услова нетривијалности решења система (2.24) – (2.26), детерминанта система односно израз (2.32) мора бити једнак нули. Нуле горње једначине су:

$$\rho_{\nu_z} = 2 \cos\left(\frac{\pi}{N_z+2}\nu_z\right), \quad \nu = 1, 2, \dots, N_z+1. \quad (2.33)$$

Тада је закон дисперзије:

$$\omega_{\alpha;k_x,k_y,\nu_z} = 2\Omega_\alpha \sqrt{\sin^2\left(\frac{a_x k_x}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{a_y k_y}{2}\right) + \cos^2\left(\frac{\pi}{2(N_z+2)}\nu_z\right)}. \quad (2.34)$$

Сменом индекса $\mu_z = N_z + 2 - \nu_z$; $\nu_z = 1, 2, \dots, N_z + 1$, формула (2.34) може бити написана у симетричном облику:

$$\omega_{\alpha; k_x, k_y, \nu_z} = 2\Omega_\alpha \sqrt{\sin^2\left(\frac{a_x k_x}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{a_y k_y}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{a_z k_z}{2}\right)} \quad (2.35)$$

где је

$$k_z = \frac{\pi \nu_z}{(N_z + 2) a_z}, \quad \nu_z = 1, 2, \dots, N_z + 1, \quad (2.36)$$

z -компонента таласног вектора. С обзиром да је $(k_z)_{\min} \neq 0$, види се да у фононском спектру постоји праг (геп) (видети [46] – [48]) иако је филм исечен из просте решетке.

Одређивањем енергија (2.35) ми смо дијагонализовали наш полазни хамилтонијан H_0 , па коначно можемо писати:

$$H_0 = \sum_{\alpha; k_x, k_y, \nu_z} E_{\alpha; k_x, k_y, \nu_z}^{(0)} \left(b_{\alpha; k_x, k_y, \nu_z}^\dagger b_{\alpha; k_x, k_y, \nu_z} + \frac{1}{2} \right), \quad (2.37)$$

где је

$$E_{\alpha; k_x, k_y, \nu_z}^{(0)} = \hbar \omega_{\alpha; k_x, k_y, \nu_z} \quad (2.38)$$

енергија фонона у танком филму у нултој апроксимацији. С обзиром на чињеницу да корени Чебишљевих полинома (2.32) леже у отвореном интервалу $(-2, 2)$, такав тип деформације ($a = b = 0$) „допушта“ постојање само запреминских стања.

Пошто су одређене осцилаторне енергије односно фреквенције, сада је потребно наћи одговарајуће амплитуде $\mathcal{A}_{\alpha, \nu_z, n_z}$. Њих можемо добити решавањем система једначина (2.24) – (2.26).

Дељењем ових једначина са $\mathcal{A}_{\alpha, \nu_z, 0}$, дати систем једначина сводимо на следећи систем од $N+2$ линеарне једначине по непознатим $\mathcal{B}_0, \mathcal{B}_1, \dots, \mathcal{B}_{N_z}$

$$\mathcal{B}_0 = 1 \quad (2.39)$$

$$\mathcal{B}_1 + \rho \mathcal{B}_0 = 0, \quad n_z = 0 \quad (2.40)$$

$$\mathcal{B}_1 + \rho \mathcal{B}_1 + \mathcal{B}_2 = 0, \quad n_z = 1 \quad (2.41)$$

$$\mathcal{B}_1 + \rho \mathcal{B}_2 + \mathcal{B}_3 = 0, \quad n_z = 2 \quad (2.42)$$

$$\mathcal{B}_{N_z-2} + \rho \mathcal{B}_{N_z-1} + \mathcal{B}_{N_z} = 0, \quad n_z = N_z - 1 \quad (2.43)$$

$$\mathcal{B}_{N_z-1} + \rho \mathcal{B}_{N_z} = 0, \quad n_z = N_z \quad (2.44)$$

где је

$$\mathcal{B}_{N_z} \equiv \mathcal{B}_{\alpha, \nu_z, n_z} = \frac{\mathcal{A}_{\alpha, \nu_z, n_z}}{\mathcal{A}_{\alpha, \nu_z, 0}}. \quad (2.45)$$

Приметимо да решења горњег система линеарних једначина представља чланове низа $\mathcal{B}_n (1 \leq n_z \leq N_z - 1)$ који задовољавају рекурентну релацију

$$\mathcal{B}_{n_z-1} + \rho \mathcal{B}_{n_z} + \mathcal{B}_{n_z+1} = 0, \quad 1 \leq n_z \leq N_z - 1, \quad (2.46)$$

са почетним условима $\mathcal{B}_0 = 1$ и $\mathcal{B}_1 = -\rho$, при чему имамо још један додатни услов за ρ :

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

Карактеристична једначина диференцне једначине (2.46) је

$$r^2 + \rho r + 1 = 0. \quad (2.47)$$

Корени ове једначине су:

$$r_{1,2} = \frac{-\rho \pm \sqrt{\rho^2 - 4}}{2}. \quad (2.48)$$

Најпре размотримо случај када је $|r_1| \neq |r_2|$ и $|\rho| < 2$. Тада је опште решење једначине (2.46) облика

$$\mathcal{B}_{n_z} = D_{r_1}^{n_z} + E_{r_2}^{n_z}. \quad (2.49)$$

Непознате коефицијенте $D = D(\rho)$ и $E = E(\rho)$, одредићемо из почетних услова. Елементарним рачуном добијамо:

$$D = \frac{\rho + \sqrt{\rho^2 - 4}}{2\sqrt{\rho^2 - 4}}, \quad E = \frac{\sqrt{\rho^2 - 4} - \rho}{2\sqrt{\rho^2 - 4}}. \quad (2.50)$$

Тада, на основу (2.49), решење (2.46) је облика:

$$\mathcal{B}_{n_z} = \frac{1}{2\sqrt{\rho^2 - 4}} \left[\left(\rho + \sqrt{\rho^2 - 4} \right) \left(\frac{-\rho - \sqrt{\rho^2 - 4}}{2} \right)^{n_z} + \left(-\rho + \sqrt{\rho^2 - 4} \right) \left(\frac{-\rho + \sqrt{\rho^2 - 4}}{2} \right)^{n_z} \right], \quad (2.51)$$

уз гранични услов (2.44), тј. $\mathcal{B}_{N_z-1}/\mathcal{B}_{N_z} = -\rho$.

Ако је $|\rho| < 2$, што одговара запреминским стањима, тада је

$$\rho = 2 \cos \xi, \quad (2.52)$$

и $r_{1,2} = -\cos \xi \pm i \sin \xi$. У овом случају за коефицијенте (2.50) добијамо:

$$D = \frac{1}{2} \left(1 - i \frac{\cos \xi}{\sin \xi} \right), \quad E = \frac{1}{2} \left(1 + i \frac{\cos \xi}{\sin \xi} \right). \quad (2.53)$$

Заменом (2.53) и (2.51) и након сређивања добијамо коначан израз за амплитуде осциловања односно помераје:

$$\mathcal{A}_{\alpha, \nu_z, n_z} = (-1)^{n_z} \frac{\sin[(n_z + 1)\xi_{\nu_z}]}{\sin \xi_{\nu_z}} \mathcal{A}_{\alpha, \nu_z, 0}, \quad (2.54)$$

$$u_{\alpha; n_x, n_y, n_z}(t) = (-1)^{n_z} \sum_{k_x, k_y, k_z} S_{\alpha; k_x, k_y, \nu_z} \mathcal{A}_{\alpha, \nu_z, n_z} \times \\ \times \left\{ b_{\alpha; k_x, k_y, \nu_z} e^{i(n_x a_x k_x + n_y a_y k_y) - it\omega_{\alpha; k_x, k_y, \nu_z}} + h.c. \right\} \frac{\sin[(n_z + 1)\xi_{\nu_z}]}{\sin \xi_{\nu_z}}, \quad (2.55)$$

при чему на основу (2.36) за ξ_{ν_z} важи

$$\xi_{\nu_z} = \frac{\pi \nu_z}{N_z + 2}, \quad \nu_z = 1, 2, \dots, N_z + 1. \quad (2.56)$$

Границни услов (2.44) са своди на $C_{N_z+1} = 0$, што заправо представља једначину за одређивање енергије система.

Како је $p_{\alpha; n_x, n_y, n_z}(t) = M \dot{u}_{\alpha; n_x, n_y, n_z}(t)$ налажењем првог извода од $u_{\alpha; n_x, n_y, n_z}$ по времену и заменом у полазни хамилтонијан (2.2) он постаје дијагоналан (2.37). При томе је изабрано да је

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

и за атомске помаке у овом случају коначно можемо писати:

$$u_{\alpha; n_x, n_y, n_z}(t) = (-1)^{n_z} \sum_{k_x, k_y, \nu_z} \sqrt{\frac{\hbar}{MN_x N_y (N_z + 2) \omega_{\alpha; k_x, k_y, \nu_z}}} \times \\ \times \left\{ b_{\alpha; k_x, k_y, \nu_z} e^{i(n_x a_x k_x + n_y a_y k_y) - it\omega_{\alpha; k_x, k_y, \nu_z}} + h.c. \right\} \sin[(n_z + 1)\xi_{\nu_z}], \quad (2.57)$$

Упоређујући добијене резултате са одговарајућим за идеалне бесконачне структуре, може се закључити следеће:

- Механичке вибрације у идеалној бесконачној структури су равни таласи у свим правцима [43] – [45], а механичке вибрације у танком филму (у складу са формулом (2.57)) су спој стојећих таласа у z-правцу и равних таласа у XOY равни. Јасно је да дуж овог правца нема никаквог преноса вибрационе енергије.

б. Три акустичке фреквенције у идеалним структурама теже нули када $k \rightarrow 0$. С друге стране, минималне фреквенције у танком филму су у складу са (2.35), дате са:

$$\min \left\{ \omega_{\alpha; k_x, k_y, v_z} \right\} = \omega_{\alpha; 0, 0, 1} = 2\Omega_\alpha \sin \left[\frac{\pi}{2(N_z + 2)} \right] \neq 0. \quad (2.58)$$

То значи да фонони у танким филмовима поседују гер $\hbar\omega_{\alpha; 0, 0, 1}$, одакле следи да је припадна активациона температура филма:

$$T_{ac}^\alpha = \frac{\hbar\omega_{\alpha; 0, 0, 1}}{k_B} = \frac{2\hbar}{k_B} \Omega_\alpha \sin \left[\frac{\pi}{2(N_z + 2)} \right], \quad (2.59)$$

тј. температура неопходна за ексцитацију фонона у филму и има коначну позитивну вредност. Види се да активациона температура опада са повећањем дебљине филма тј. са порастом N_z . За изузетно танке филмове активациона температура је релативно висока.

Амплитуде помераја (2.57) су периодичне функције по целом кристалу (стања нису локализована) и такав тип колективних осцилаторних побуђења којима одговара овакава функција помераја називају се запреминским.

У случају када су a и b различити од нуле, дозвољене вредности енергије у филму се морају одређивати из трансцендентне једначине која се добија из (2.29).

У зависности од параметра a и b , сада се у систему могу поред запреминских појавити и површинска или локализована стања¹, што је и било за очекивати с обзиром да постоје границе у систему. Најпре размотримо случај запреминских стања, а потом услове под којима се појављују и локализована побуђења у посматраном систему.

Испитаћемо утицај параметара површинске деформације a и b на осцилаторни спектар и просторну расподелу побуђења. Размотримо најпре случај запреминских стања. Тада је

$$C_{n_z}(\rho_\nu) = \frac{\sin[(n_z + 1)\xi_\nu]}{\sin \xi_\nu}, \quad \sin \xi_\nu \neq 0, \quad (2.60)$$

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

Замењујући овај израз у (2.29), долазимо до следеће трансцендентне једначине за одређивање енергије:

$$\cot(N_z + 2)\xi_\nu = \frac{1 - (a+b)\cos \xi_\nu + ab \cos 2\xi_\nu}{ab \sin 2\xi_\nu - (a+b)\sin \xi_\nu} \quad (2.61)$$

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

¹ Под овим појмом се у литератури (видети [42]) подразумевају и стања која су лоцирана у околини примеса, ваканција, разних дефеката итд.

Како функција $\cot(N_z + 2)\xi_\nu$ има период $\pi/(N_z + 2)$, очигледно она у интервалу $[0, \pi]$ има $(N_z + 2)$ -периода и $(N_z + 2)$ пута пресеца ξ осу. Вредности за ξ се у оштем случају могу наћи само нумерички и графички. Заменом корена у једначину за фононске фреквенције (2.30), добијамо спектар елементарних побуђења фононског система у танком филму:

$$\omega_{\alpha; k_x, k_y, \nu_z} = 2\Omega_\alpha \sqrt{\sin^2\left(\frac{a_x k_x}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{a_y k_y}{2}\right) + \Delta_\nu^\alpha(a, b, N_z)}, \quad (2.62)$$

где

$$\Delta_\nu^\alpha(a, b, N_z) = \frac{1}{2}(1 + \cos\xi_\nu); \quad \nu = 1, 2, \dots, N_z + 1, \quad (2.63)$$

представља фононски геп у посматраном филму, а ξ_ν су корени који се одређују из трансцендентне једначине (2.61). Из релације (2.62) се види да спектар фононских побуђења у филму има тзв. активациони карактер [49] што значи даје најнижа фононска фреквенција различита од нуле. Најнижу осцилаторну фреквенцију даје решење $\xi_\nu = \xi_N$, које одговара пресеку у интервалу $\left[\frac{N_z + 1}{N_z + 2}\pi, \pi\right]$, јер је за њега $1 + \cos\xi$ најближе нули. Овај нови ефекат (процеп у фононском спектру) је очигледно последица реалног присуства граница код филм-структуре. Геп је већи уколико је филм тањи. У случају великог N_z , важи $\lim_{N_z \rightarrow \infty} \frac{N_z + 1}{N_z + 2} \rightarrow 1$, па је $\xi_N = \pi$ односно $\cos\pi = -1$, што значи да геп изчезава као и у одговарајућој идеалној бесконачној структури.

Логично се намеће питање: да ли за

$$\rho_\nu = 2 \cos\xi_\nu, \quad \nu = 1, 2, \dots, N_z + 1, \quad (2.64)$$

функција на десној страни (2.61) увек има $(N_z + 1)$ пресек са $\cot(N_z + 2)\xi$?

Једначина (2.61) на десној страни не зависи од броја слојева N_z већ само од површинских параметара a и b . У том смислу посматраћемо следећа три карактеристична случаја. Најпре претпоставимо да су површински параметри позитивни ($a, b > 0$), тј.

1. a и b припадају отвореном интервалу $(0, 1)$. Тада једначина (2.61) на десној страни у интервалу $(0, \pi)$ је непрекидна и у том случају постоји $(N_z + 1)$ -корен односно пресек са функцијом $\cot(N_z + 2)\xi$. Према томе та стања одговарају запреминским и припадају отвореном интервалу $(-2, 2)$.
2. $a=1$ и $b=1$. У овом случају функција има вертикалну асимптоту у тачки $\xi = 0$, јер именилац на десној страни једначине (2.61) изчезава тј.

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

Један пресек је „нестао“ јер је забрањена вредност $\xi = 0$ ако тражимо решења помоћу (2.60). Тада осим N_z корена који одговарају запреминским стањима постоји једно решење² које одговара површинском стању. То су стања која су локализована око граничних површина кристалног филма. Међутим, важно је истаћи чињеницу да у случају стања са $|\rho| > 2$, не мора у општем случају да буду површинска. За та стања по дефиницији важи да им амплитуда експоненцијално опада ка унутрашњости филма.

3. $a>1$ и $b>1$. Тада у систему осим запреминских, постоје и стања са $|\rho| > 2$. Услов за појаву ових ($|\rho| > 2$) стања се може одредити једноставним захтевом да функција на десној страни једначине (2.61) има вертикалну асимптоту, што се своди на следеће:

$$\cos \xi = \frac{a+b}{2ab}, \quad 0 \leq \frac{a+b}{2ab} \leq 1. \quad (2.65)$$

Ово дејство представља услов за појаву и егзистенцију и површинских стања у посматраном систему.

Тада је³:

$$C_n(\rho) = \frac{\sinh[(n+1)\eta]}{\sinh \eta}, \quad (2.66)$$

$$\rho = 2 \cosh \eta, \quad \eta > 0.$$

Заменом (2.66) у једначину (2.29) долазимо до израза за одређивање енергија ових ($|\rho| > 2$) стања. И у овом случају то је трансцендентна једначина која има следећи облик:

$$\coth(N_z + 2)\eta = \frac{1 - (a+b)\cosh \eta + ab \cosh 2\eta}{ab \sinh 2\eta - (a+b)\sinh \eta}, \quad \eta > 0. \quad (2.67)$$

У овом случају израз (2.62) за енергију одговарајућих вибрационих стања је облика:

$$E = 2\Omega_\alpha \sqrt{\sin^2\left(\frac{a_x k_x}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{a_y k_y}{2}\right) + \frac{1}{2}(1 + \cosh \eta)}, \quad (2.68)$$

при чему се η добија као решење горње трансцендентне једначине. Из ове једначине се види да је у дуготаласној апроксимацији овај израз различит од нуле, тј. постоји геп у фононском спектру. У овом случају његова минимална вредност је различита од нуле и већа је него у случају запреминских стања (када је $|\rho| < 2$).

² Овај пресек (корен) је изван интервала (-2,2) и према томе не може се очекивати пресек кривих у једначини (2.61) за дате вредности параметара.

³ Постоје две могућности, $\rho > 2$ и $\rho < -2$. Посматрајмо најпре случај $\rho > 2$.

Ради лакше анализе узмимо случај симетричне деформације⁴, тј. када је $a=b$. Очигледно услов (2.65) за појаву наведених стања је $\cos \xi = 1/a \leq 1$, тј. $0 \leq \xi_{va} \leq \pi/2$ када је $a=1$ и $a \rightarrow \infty$ респективно.

Аналогни закључци важе и у случају када су површински параметри негативни, односно када је интеракција на граничним површинама ослабљена. У том случају вертикална асимптота се налази у интервалу $\pi/2 \leq \xi_{va} \leq \pi$.

С обзиром да је $\cosh \eta$ увек позитивна функција, јасно је да припадна стања са $\rho > -2$ се могу тражити користећи следећу репрезентацију Чебишевљевих полинома:

$$C_{n_z}(\rho) = (-1)^{n_z} \frac{\sinh [(n_z + 1)\eta]}{\sinh \eta}, \quad (2.69)$$

$$\rho = -2 \cosh \eta, \quad \eta > 0.$$

Заменом (2.69) у израз (2.29) долазимо такође до трансцендентне једначине за одређивање енергије система која је облика:

$$\coth(N_z + 2)\eta = \frac{1 + (a + b)\cosh \eta + ab \cosh 2\eta}{ab \sinh 2\eta + (a + b)\sinh \eta}, \quad \eta > 0. \quad (2.70)$$

У овом случају израз за енергију датих стања фононског система је облика:

$$E = 2\Omega_\alpha \sqrt{\sin^2\left(\frac{a_x k_x}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{a_y k_y}{2}\right) + \frac{1}{2}(1 - \cosh \eta)}. \quad (2.71)$$

Већ смо напоменули да поред запреминских стања која су равномерно распоређена по целој запремини кристала, у структурата код којих је нарушена дискретна трансациона инваријантност се могу појавити и површинска фононска стања. Природно је да се та побуђења управо локализују на местима где је „прекинута“ дискретна трансациона симетрија, тј. око граничних површина филма док у унутрашњости структуре практично не постоје. Уствари, амплитуде A_{n_z} ових стања експоненцијално опадају од граничне површине према унутрашњости филма и дате су на следећи начин [2]:

$$A_{n_z} = D_{n_z} e^{-n_z \eta}, \quad \eta = ak > 0. \quad (2.72)$$

Формално из ове релације следи да се траже стања чији је таласни вектор дуж z -правца чисто имагинаран [45] ($\eta \rightarrow i\xi$, тада је очигледно $\rho = 2\cos(i\xi) = 2\cosh \eta$). Због захтева $\eta > 0$, очигледан је физички смисао овог решења: стања која су локлизована на површини су највероватнија јер им квадрат модула амплитуде експоненцијално опада са удаљавањем од граничне површине. Отуда им и природан назив.

⁴ На тај начин се не губи на општости и једино у том случају се не појављују локализована стања уз обе граничне површине, што није случај код асиметричне деформације.

Размотримо најпре каква локализована стања треба очекивати код филма. С обзиром да филм поседује две граничне површине, природно је да ће и одговарајућа побуђења бити локализована уз њих. У том случају амплитуде \mathcal{A}_{n_z} за стања која су локализована око граничних површина $n_z=0$ и $n_z=N_z$, у општем случају имају следећи облик:

$$\mathcal{A}_{n_z} = D_0 e^{-n_z \eta} + D_N e^{-(N_z - n_z) \eta}; \quad \eta > 0, \quad (2.73)$$

с обзиром да је за $n_z=0$ занемарив други члан у горњем изразу односно први ако је $n_z=N_z$. После замене (2.73) и (2.25) налазимо:

$$\rho = -2 \cosh \eta, \quad \eta = ak,$$

што нас води на дате изразе (2.68) и (2.71) за енергије површинских стања фононског система. Заменом (2.73) у граничне једначине (2.24) и (2.26) долазимо до система једначина за одређивање непознатих константи D_0 и D_N (уз услов да је $e^{-N_z \eta} \approx 0$):

$$\begin{aligned} D_0(e^\eta - a) &= 0, \\ D_N(e^\eta - b) &= 0. \end{aligned} \quad (2.74)$$

Овај систем, наравно допушта више могућности. Најрелевантније су две. Ако је $D_N=0$ и $e^\eta = a$, тада имамо стања локализована уз површински слој 0. Ако је $D_0=0$ и $e^\eta = b$ онда су елементарна побуђења локализована уз гранични површински слој N_z . С обзиром да је $\eta = ak > 0$, услов егзистенције површинских стања је:

$$\eta = \ln a \Rightarrow |\alpha| > 1, \quad (2.75)$$

односно

$$\eta = \ln b \Rightarrow |b| > 1. \quad (2.76)$$

Међутим, интересантна је могућност да колективна побуђења - фонони, буду локализовани уз оба гранична слоја, а да у унутрашњости не постоје. То је на основу (2.74) могуће само онда када је $a = b = \lambda$. Тада су D_0 и D_N различити од нуле и амплитуде (2.73) уз претроставку $D_0 = D_N \equiv D$ постају

$$\mathcal{A}_{n_z} = D \left[e^{-n_z \eta} + e^{-(N_z - n_z) \eta} \right]; \quad \eta = ak > 0. \quad (2.77)$$

Очигледно је да амплитуде \mathcal{A}_{n_z} имају максималну вредност D на нултом и N_z -том слоју, док је минимална вредност на средини филма за $n_z = N_z / 2$, и износи

$$\mathcal{A}_{N_z/2} = 2D e^{-N_z \eta} \approx 0. \quad (2.78)$$

Да би η било позитивно, мора на основу (2.75) и (2.76) бити $|\lambda| > 1$, што се слаже са анализма које следе из трансцендентне једначине (2.61).

Према томе у филму се могу појавити површинска стања само онда када су задовољени одређени услови, што наравно зависи од величине тзв. површинских параметара a и b као и услова који владају на границама. Треба нагласити да што се тиче запреминских стања, не постоје никаква ограничења и ова побуђења су увек присутна у систему.

С обзиром на симетрију која постоји када је ($a = b = \lambda$), довољно је да се испитају стања око једне од граничних површина. Због те чињенице даље анализе ће бити вршене помоћу изразу (2.72), што значи да ћемо испитивати стања локализована уз граничну површину за коју је $n_z=0$, с обзиром да на граничној равни $n_z=N_z$ (други сабирак у једначини (2.73)) имамо идентичну физичку слику као у случају $n_z=0$, те је беспредметно испитивати решење тог типа.

Решимо систем једначина (2.25) да бисмо нашли одговарајуће амплитуде за случај запреминских стања, а потом дијагонализацијом хамилтонијана и одговарајуће нормиране атомске помераје.

Дељењем једначина (2.24) и (2.25) са $\mathcal{A}_{\alpha, \nu_z, 0}$, добијамо систем од $N+2$ линеарне једначине по непознатим $\mathcal{B}_0, \mathcal{B}_1, \dots, \mathcal{B}_{N_z}$

$$\mathcal{B}_0 = 1 \quad (2.79)$$

$$\mathcal{B}_1 + (\rho - a)\mathcal{B}_0 = 0, \quad n_z = 0 \quad (2.80)$$

$$\mathcal{B}_{n_z+1} + \mathcal{B}_{n_z-1} + \rho \mathcal{B}_{n_z} = 0, \quad 1 \leq n_z \leq N_z - 1 \quad (2.81)$$

$$\mathcal{B}_{N_z-1} + (\rho - b)\mathcal{B}_{N_z} = 0, \quad n_z = N_z \quad (2.82)$$

где је

$$\mathcal{B}_{n_z} \equiv \mathcal{B}_{\alpha, \nu_z, n_z} = \frac{\mathcal{A}_{\alpha, \nu_z, n_z}}{\mathcal{A}_{\alpha, \nu_z, 0}}. \quad (2.83)$$

Његово решење можемо добити стандардним поступком за решавање диференцних једначина полазећи од једначине (2.81) са почетним условима (2.79) и (2.80). Наравно, у обзир морамо узети додатни услов (2.82) за \mathcal{B}_{N_z} који представља гранични услов за низ \mathcal{B}_{n_z} .

Аналогно претходном случају, за решење карактеристичне једначине посматране рекурентне релације (2.81) одмах можемо писати:

$$r_{1,2} = \frac{-\rho \pm \sqrt{\rho^2 - 4}}{2}. \quad (2.84)$$

Из ове релације је јасно да у зависности од ρ имамо у општем случају три типа могућих решења за произвољни члан низа \mathcal{B}_{n_z} , односно одговарајуће амплитуде.

Када је $|\rho| < 2$ ($r_1 \neq r_2$), тада је опште решење рекурентне релације (2.81)

$$\mathcal{B}_{n_z} = Dr_1^{n_z} + Er_2^{n_z}, \quad (2.85)$$

где су

$$D = \frac{\rho - 2a + \sqrt{\rho^2 - 4}}{2\sqrt{\rho^2 - 4}}, \quad E = \frac{\sqrt{\rho^2 - 4} - \rho + 2a}{2\sqrt{\rho^2 - 4}}, \quad (2.86)$$

константе одређене из почетних услова.

Видели смо да у случају $|\rho| < 2$, важи да је $\rho = 2\cos\xi$. Тада је:

$$D = \frac{1}{2} \left(1 - i \frac{\cos \xi - a}{\sin \xi} \right), \quad E = \frac{1}{2} \left(1 + i \frac{\cos \xi - a}{\sin \xi} \right), \quad (2.87)$$

што након замене у (2.85) коначно за општи члан низа добијамо

$$\mathcal{B}_{\alpha, \nu_z, n_z} = (-1)^{n_z} \frac{\sin[(n_z + 1)\xi_{\nu}] - a \sin n_z \xi_{\nu}}{\sin \xi_{\nu}}. \quad (2.88)$$

С обзиром да су ξ_{ν} решења трансцендентне једначине (2.61), може се показати да важи:

$$\sum_{n_z=0}^{N_z} \mathcal{B}_{\alpha, \nu_z, n_z} \mathcal{B}_{\alpha, \nu_z, n_z} = \frac{(N_z + 1)(1 - 2a \cos \xi_{\nu_z} + a^2) + 1 - a^2}{2 \sin^2 \xi_{\nu_z}}. \quad (2.89)$$

Тада за амплитуде коначно можемо писати:

$$\mathcal{A}_{\alpha, \nu_z, n_z} = (-1)^{n_z} \frac{\sin[(n_z + 1)\xi_{\nu_z}] - a \sin n_z \xi_{\nu}}{\sin \xi_{\nu_z}} \mathcal{A}_{\alpha, \nu_z, 0}. \quad (2.90)$$

Одговарајући помераји су:

$$\begin{aligned} u_{\alpha; n_x, n_y, n_z}(t) &= (-1)^{n_z} \sum_{k_x, k_y, k_z} S_{\alpha; k_x, k_y, \nu_z} \mathcal{A}_{\alpha, \nu_z, 0} \times \\ &\times \left\{ b_{\alpha; k_x, k_y, \nu_z} e^{i(n_x a_x k_x + n_y a_y k_y) - it \omega_{\alpha; k_x, k_y, \nu_z}} + h.c. \right\} \frac{\sin[(n_z + 1)\xi_{\nu_z}] - a \sin n_z \xi_{\nu}}{\sin \xi_{\nu}}. \end{aligned} \quad (2.91)$$

Наравно и у овом случају гранична једначина (2.82) представља једначину за одређивање осцилаторних фреквенција у систему и индентична је једначини (2.29). Фреквенције $\omega_{\alpha; k_x, k_y, \nu_z}$ у горњој једначини дате су релацијом (2.62), а одговарајуће ξ_{ν} се добија као решење трансцендентне једначине (2.61).

Диференцирањем израза (2.91) по времену и заменом у хамилтонијан (2.2), он се своди на дијагоналан облик:

$$H_0 = \sum_{\alpha; k_x, k_y, \nu_z} \hbar \omega_{\alpha; k_x, k_y, \nu_z} \left(b_{\alpha; k_x, k_y, \nu_z}^+ b_{\alpha; k_x, k_y, \nu_z} + \frac{1}{2} \right), \quad (2.92)$$

уз услов да је

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

где је

$$\mathcal{N}_z = \frac{(N_z + 1)(1 - 2a \cos \xi_\nu + a^2) + 1 - a^2}{2 \sin^2 \xi_\nu}. \quad (2.93)$$

Сада можемо писати коначан израз за атомске помераје (2.91):

$$u_{\alpha; n_x, n_y, n_z}(t) = (-1)^{n_z} \sum_{k_x, k_y, k_z} \sqrt{\frac{\hbar}{MN_x N_y \mathcal{N}_z \omega_{\alpha; k_x, k_y, \nu_z}}} \times \\ \times \left\{ b_{\alpha; k_x, k_y, \nu_z} e^{i(n_x a_x k_x + n_y a_y k_y) - it \omega_{\alpha; k_x, k_y, \nu_z}} + h.c. \right\} \frac{\sin[(n_z + 1)\xi_\nu] - a \sin n_z \xi_\nu}{\sin \xi_\nu}. \quad (2.94)$$

У случају симетричне деформације аналогно (2.57), помераји за запреминска стања су дати као комбинација равних таласа у XOY равни и стојећих таласа у z -правцу.

Такође треба истаћи чињеницу да фреквенција у горњем изразу не може бити једнака нули, тако да су помаци коначни што није случај код идеалних бесконачних структура у дуготаласној апроксимацији (када $k \rightarrow 0$, помераји постају бесконачни тј. $u_n \rightarrow \infty$ што баш нема физичког смисла).

Ако је $\rho = \pm 2$, тада су корени карактеристичне једначине једнаки (тј. $r_1 = r_2$) и опште решење диференцне једначине (2.81) је:

$$\mathcal{B}_{n_z} = (\pm 1)^{n_z} (D_1 + n_z E_1). \quad (2.95)$$

За константе једноставно добијамо да су $D_1 = 1$ и $E_1 = 1 - a$. Границни услов (2.82) у овом случају еквивалентан је следећем:

$$N_z(1 - a)(1 - b) = a + b - 2, \quad (2.96)$$

што за $a \neq +1$ и $b \neq +1$ даје $N_z = \frac{a+b-2}{(1-a)(1-b)}$. У случају $a=1$, да би вредност за N_z

уопште постојала мора бити $b=1$ и тада је N_z произвољно. То је у складу са раније изнетим закључцима. Аналогно се налазе амплитуде и помераји у случају када је $|\rho| > 2$, па због тога овде неће бити нађени.

Што се тиче површинских стања, важно је истаћи да се она појављују у систему када је $|\rho| > 2$. Како амплитуда ових стања у складу са једначином (2.72), мора експоненцијално да опада, коначно можемо писати израз за нормиране помераје који дијагонализују хамилтонијан H_0 :

$$u_{n_x, n_y, n_z}(t) = (-1)^{n_z} \sqrt{\frac{\hbar(1-e^{-2\eta})}{2MN_x N_y}} \sum_{k_x, k_y} e^{-n_z \eta} e^{i(n_x a_x k_x + n_y a_y k_y)} (b_{k_x, k_y, \eta} + b_{-k_x, -k_y, \eta}^+), \quad \eta > 0. \quad (2.97)$$

Израз за амплитуде и фононске помераје добијен је под претпоставком да су површински параметри a и b позитивни. У случају када су они негативни, одговарајући изрази би испред датих параметара једноставно променили знак и овде неће бити експлицитно наведени.

У већ анализираном закону дисперзије (2.62), појављују се величине $\Delta_v^\alpha(a, b, N_z)$ које се добијају као корени трансцендентних једначина (2.61), (2.67) и (2.70).

Посматрајмо најпре случај када су површински параметри једнаки нули, тј. $a=b=0$. Тада је на основу (2.63):

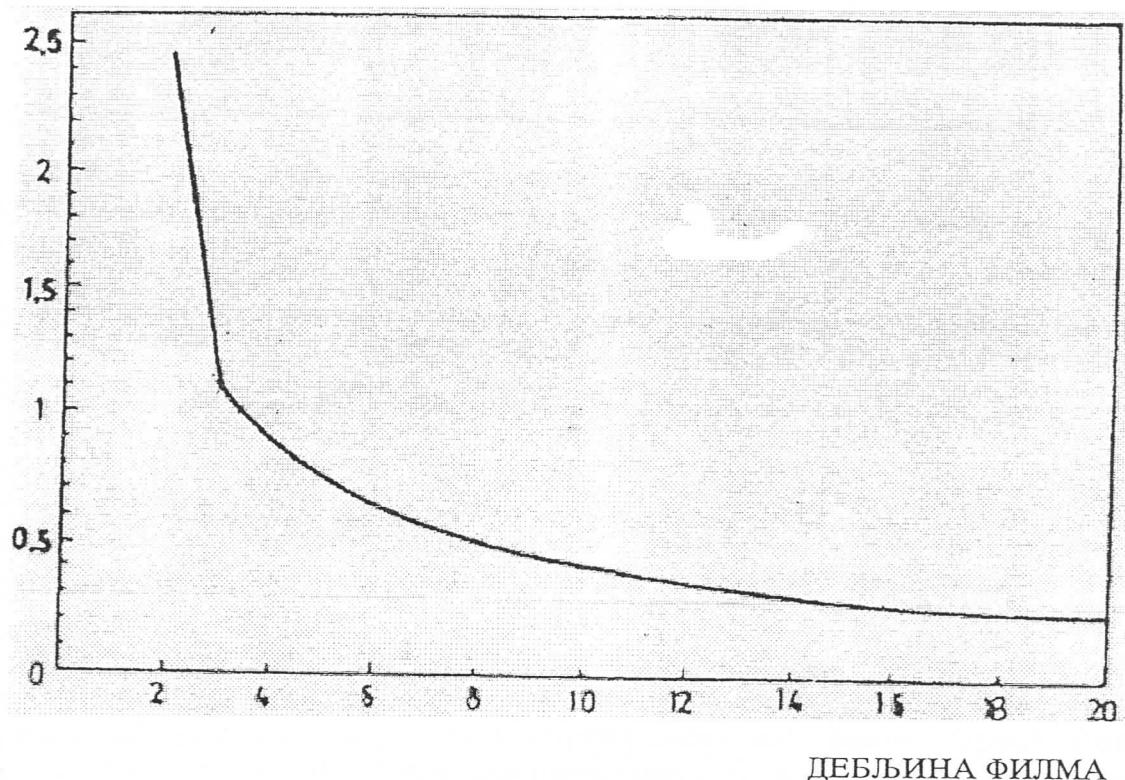
$$\Delta_v^\alpha(0, 0, N_z) = \frac{1}{2} \left[1 + \cos \left(\frac{\pi}{N_z + 2} v \right) \right], \quad v = 1, 2, \dots, N_z + 1, \quad (2.98)$$

што представља процеп у фононском спектру (2.62) иако је како раније наглашено филм „исечен“ из просте решетке. Овај процеп за минималну вредност таласног вектора ($v = N_z + 1$), износи

$$\Delta_{N+1}^\alpha(0, 0, N_z) = \frac{1}{2} \left[1 + \cos \left(\frac{\pi(N+1)}{N_z + 2} \right) \right]. \quad (2.99)$$

То је како је већ наглашено, минимална енергија за побуђивање колективних осцилација у филму. Види се да је она утолико већа, уколико је филм тањи. На слици 1 приказана је зависност величине фононског прага од броја слојева (дебљине) филма.

Рачун показује, што се уочава и са приложене слике, да је праг практично једнак нули за филм од 40-45 слојева.



Слика 1

Зависност величине фононског йрага од броја слојева при $a = b = 0$

Треба истаћи да уколико је деформација већа (веће вредности површинских параметара), праг је нешто већи и изчезава са повећањем дебљине отприлике на сличан начин без обзира на тип деформације (симетричан или асиметричан). Наведени број слојева када процеп практично изчезава треба у суштини усвојити као горњу границу „стварно“ танког филма код којег не долазе до изражавајућих ефекти коначне дебљине.

Повећање параметара доводи до тога да се у систему осим запреминских појављују и површинска стања ($|a, b| \geq 1$), за која је карактеристично да имају виши праг него одговарајућа запреминска стања ($|a, b| < 1$). У оба случаја најинтересантније питање са практичне тачке гледишта представља величина фононског гепа у зависности од површинских параметара a и b . Све анализе показују да већим вредностима деформационих параметара a и b , одговарају веће вредности енергије активације а тиме и више припадне температуре побуђивања фонона у овим структурима.

Овај закључак је практично важан због тога што указује на који начин треба деформисати филм да би број фонона у њему био што мањи. По свој прилици, повећање површинских параметара a и b се најлакше може постићи ако се филм изложи јаким притисцима на граничне површине кристала. До оваквог закључка

се дошло анализом кристала у којима делују силе Ленард-Џонсовог типа. Потенцијал ових сила је дат следећим изразом (видети у [50]):

$$V(r) = \frac{A}{r^{12}} - \frac{B}{r^6}, \quad (2.100)$$

где су A и B -позитивни коефицијенти, а r -растојање између атома. Ове силе се у суштини срећу код молекула кристала.

Хукова константа је други извод потенцијалне енергије (2.100) у тачки минимума ($r_0 = (2A/B)^{1/6}$), и дата је са $C = 36B\left(\frac{B}{2A}\right)^{4/3}$. Под високим притиском слојеви у филму се зближавају. Тада r_0 односно A опада. Када A опада види се да C расте и тиме расту параметри површинске деформације. Отуда и оправдање зашто се узимају позитивни параметри ($a>0$, $b>0$), и то да њиховим порастом добијамо жељене ефекте који би свакако могли да нађу практичну примену.

С обзиром да јача деформација ствара већи процеп, а самим тим и енергију активације фонона, што са своје стране значи да се побољшавају услови за суперпроводно кретање електрона у случају металног филма. Према томе, подвргавањем танких плочица високим притисцима могао би се закључак горње теоријске анализе искористити у том смислу. То би не само потврдило горње резултате већ би свакако нашло одговарајуће место у пракси.

2.2. Електрон-фонон интеракција и утицај на суперкондуктивну критичну температуру

Поступно самосагласно описивање својства електрон-фононског система у металима безусловно је једно од централних и најважнијих проблема у физици чврстог стања. Познато је да електрон-фонон интеракција условљава такве кооперативне појаве као што су ефективно привлачење између два електрона у решетки које доводи до образовања Куперових парова и до појаве суперпроводљивости, појаве таласа густине наелектрисања [52], аутолокализације електрона са образовањем поларона [53] и солитона [54], структурних нестабилности итд. Такође интеракција односно расејање електрона на фононима доводи до појаве електричног отпора.

Основни циљ овог параграфа јесте да се добије самосагласан опис танког филма у присуству електрон-фонон интеракције.

Чињеница је да атоми осцилују око својих равнотежних положаја и то ћемо сада узети у обзир. Међутим, најпре поближе истакнимо неке детаље. Наиме, атоме (јоне) ћемо третирати као круте објекте који остају такви приликом осциловања. Шта то поближе значи? Узмимо због једноставности један „спољашњи“ електрон и остатак атома („језгр“). Стање и енергетски ниво (E_n) тог електрона не одређује само матично језгр, већ и околни атоми.

Кругост значи да приликом осциловања решетке енергетски ниво електрона E_n на датом атому се континуирано и споро мења, тј. адијабатски прати промене околног кристалног потенцијала. Та је претпоставка коректна уз услов да су карактеристичне фреквенције осциловања решетке ω_{res} , пуно мање од разлике енергије E_n и првог вишег квантног нивоа у који би електрон могао прећи. Другим речима електрони суовољно брзи да скоро тренутно прилагоде своје стање потенцијалу. Дакле, они нити прелазе на суседне јоне (док год занемарујемо интеграле резонантног прекривања), нити се побуђују на виша стања на властитом јону-атом се не поларизује због осциловања решетке.

Да бисмо формулисали хамилтонијан електро-фонон интеракције полазимо од израза за електронски хамилтонијан у идеалној структури [3]. Хамилтонијан „замрзнуте“ структуре, према [51] има облик:

$$H = \sum_{\vec{n}\vec{m}} W_{\vec{n}\vec{m}} \alpha_{\vec{n}}^+ \alpha_{\vec{n}} - \sum_{\vec{n}\vec{m}} W_{\vec{n}\vec{m}} \alpha_{\vec{n}}^+ \alpha_{\vec{m}}, \quad (2.101)$$

где су $\alpha_{\vec{n}}^+ (\alpha_{\vec{n}})$ Ферми-оператори који креирају (анихилирају) електроне на чвору \vec{n} , док су са $W_{\vec{n}\vec{m}} = W_{\vec{m}\vec{n}} = W_{\vec{n}-\vec{m}}$ обележени интеграли резонантног прекривања⁵.

На температурата различитим од нуле односно услед загревања или механичког дејства, атоми (молекули или јони) кристалне решетке се померају из (око) равнотежног положаја \vec{n} и \vec{m} , што се може изразити као:

⁵ У дисертацији ће се користити и други назив за ове матричне елементе: јон-јон интеракције.

$$\vec{n} \rightarrow \vec{n} + \vec{u}_{\vec{n}} ; \quad \vec{m} \rightarrow \vec{m} + \vec{u}_{\vec{m}} , \quad (2.102)$$

где су $\vec{u}_{\vec{n}}$ и $\vec{u}_{\vec{m}}$ одговарајући фононски помераји јона из равнотежног положаја \vec{n} и \vec{m} . У моделу јаке везе [55] може се сматрати да се при померању јона из положаја равнотеже мењају само резонантни интеграли $W_{\vec{n}-\vec{m}}$. Ако претпоставимо да су помераји чвррова решетке мали (што је реално на релативно ниским температурама), онда се величина $W_{\vec{n}-\vec{m}}$ може развити у Тайлоров ред (око равнотежног положаја) тако да у линеарној апроксимацији по померајима можемо писати:

$$W_{\vec{n}-\vec{m}} \rightarrow W_{\vec{n}-\vec{m} + (\vec{u}_{\vec{n}} - \vec{u}_{\vec{m}})} \approx W_{\vec{n}-\vec{m}} + (\vec{u}_{\vec{n}} - \vec{u}_{\vec{m}}) \nabla_{\vec{n}-\vec{m}} W_{\vec{n}-\vec{m}} . \quad (2.103)$$

На тај начин, ако изоставимо електронски хамилтонијан (када се јони налазе у својим равнотежним положајима), долазимо до хамилтонијана електрон-фонон интеракције:

$$H_{\text{int}} = H_{\text{int}}^{(I)} + H_{\text{int}}^{(II)} , \quad (2.104)$$

где је:

$$H_{\text{int}}^{(I)} = \sum_{\vec{n}\vec{m}} (\vec{u}_{\vec{n}} - \vec{u}_{\vec{m}}) \nabla_{\vec{n}-\vec{m}} W_{\vec{n}-\vec{m}} \alpha_{\vec{n}}^+ \alpha_{\vec{n}} , \quad (2.105)$$

и

$$H_{\text{int}}^{(II)} = - \sum_{\vec{n}\vec{m}} (\vec{u}_{\vec{n}} - \vec{u}_{\vec{m}}) \nabla_{\vec{n}-\vec{m}} W_{\vec{n}-\vec{m}} \alpha_{\vec{n}}^+ \alpha_{\vec{m}} . \quad (2.106)$$

Хамилтонијани (2.105) и (2.106) записани су преко градијента јон-јон интеракције због тога што у филму због нарушене дискретне трансляционе симетрије треба строго контролисати положаје атома, а то (2.105) и (2.106) пошто су дати у конфигурационој репрезентацији омогућују.

У литератури је уобичајено [56] да се за масивне структуре изврши Фурије-транформација јон-јон интеракције и да се развије у ред одговарајући експонент:

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

Укључивањем другог члана горњег израза у хамилтонијан H_{int} добијамо хамилтонијан електрон-фонон интеракције. Овај пут је простији али не допушта пуну контролу атомских позиција која је за филм неопходна јер се у филму параметри око граничних површина разликују од запреминских параметара.

У складу са већ коришћеном апроксимацијом најближих суседа, за интеграле трансфера $W_{\vec{n}-\vec{m}}$ електрона са чврса \vec{n} на чврс \vec{m} можемо увести следеће ознаке:

$$\begin{aligned}
W_{n_x n_y n_z; n_x \pm 1 n_y n_z} &= W_x(a_x) \equiv W_x \\
W_{n_x n_y n_z; n_x n_y \pm 1 n_z} &= W_y(a_y) \equiv W_y \\
W_{n_x n_y n_z; n_x n_y n_z \pm 1} &= W_z(a_z) \equiv W_z
\end{aligned} \tag{2.107}$$

Такође у апроксимацији најближих суседа градијенти су дати као:

$$\begin{aligned}
\nabla_{n_x n_y n_z; n_x \pm 1 n_y n_z} &= \mp \vec{i} \frac{\partial}{\partial a_x}, \\
\nabla_{n_x n_y n_z; n_x n_y \pm 1 n_z} &= \mp \vec{j} \frac{\partial}{\partial a_y}, \\
\nabla_{n_x n_y n_z; n_x n_y n_z \pm 1} &= \mp \vec{k} \frac{\partial}{\partial a_z}.
\end{aligned} \tag{2.108}$$

На основу (2.107) и (2.108) хамилтонијан електрон-фонон интеракције (2.104) за масивну структуру може се записати у облику:

$$H_{\text{int}}^{(B)} = H_{\text{int}}^{(I)} + H_{\text{int}}^{(II)} \tag{2.109}$$

где је:

$$H_{\text{int}}^{(I)} = \sum_{nj\gamma} \frac{\partial W_\gamma}{\partial a_\gamma} \left(\bar{u}_{n+\lambda_\gamma}^j - \bar{u}_{n-\lambda_\gamma}^j \right)_\gamma \alpha_n^+ \alpha_n, \tag{2.110}$$

$$H_{\text{int}}^{(II)} = - \sum_{nj\gamma} \frac{\partial W_\gamma}{\partial a_\gamma} \left[\left(\bar{u}_{n+\lambda_\gamma}^j - \bar{u}_{n_\gamma}^j \right)_\gamma \alpha_n^+ \alpha_{n+\lambda_\gamma} + \left(\bar{u}_{n-\lambda_\gamma}^j - \bar{u}_{n_\gamma}^j \right)_\gamma \alpha_n^+ \alpha_{n-\lambda_\gamma} \right]. \tag{2.111}$$

Горе уведене ознаке су следеће:

$$\begin{aligned}
n &= (n_x, n_y, n_z); \quad \gamma = (x, y, z) \\
n \pm \lambda_x &\equiv (n_x \pm 1, n_y, n_z) \\
n \pm \lambda_y &\equiv (n_x, n_y \pm 1, n_z) \\
n \pm \lambda_z &\equiv (n_x, n_y, n_z \pm 1),
\end{aligned} \tag{2.112}$$

док индекс j означава фононску грану код које је за дату просту структуру, једна лонгитудинална и две трансверзалне.

Хамилтонијан интеракције (2.109) написан на овај начин стриктно говорећи важи за масивну структуру. Међутим, он се такође може користити и за анализу структуре са нарушеном симетријом као што су танки кристали (популарно танки филмови).

Приликом формирања хамилтонијана електрон-фонон интеракције за филм, треба водити рачуна о томе да јон-јон интеракције у граничним слојевима трпе промене. Претпоставићемо да су промене у унутрашњим слојевима занемариве. На основу овога што је речено можемо писати:

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

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

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

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

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

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

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

$$\text{за } n_z = 0; \quad m_z = -1, \quad + \frac{\partial W_z}{\partial a_z} = 0, \quad \text{за } n_z = 0; \quad m_z = 1, \quad - \frac{\partial W_z}{\partial a_z} = - \frac{\partial W_z^{(0)}}{\partial a_z}$$

$$\text{за } n_z = N_z ; \quad m_z = N_z - 1, \quad + \frac{\partial W_z}{\partial a_z} = + \frac{\partial W_z^{(N)}}{\partial a_z}$$

$$\text{за } n_z = N_z ; \quad m_z = N_z + 1, \quad - \frac{\partial W_z}{\partial a_z} = 0 . \quad (2.113)$$

С обзиром на (2.113) хамилтонијан електрон-фонон интеракције у филму може се записати као:

$$H_{\text{int}}^{(F)}(j) = H_{SS}^{(I)}(j) + H_{SS}^{(II)}(j) + H_{SV}^{(I)}(j) + H_{SV}^{(II)}(j) + H_{VV}^{(I)}(j) + H_{VV}^{(II)}(j) . \quad (2.114)$$

Изрази за поједиње делове $H_{\text{int}}^{(F)}(j)$ су следећи:

$$\begin{aligned} H_{SS}^{(I)}(j) = & \sum_{n_x n_y} \left\{ \left[\left(\vec{u}_{n_x + 1 n_y 0}^j - \vec{u}_{n_x - 1 n_y 0}^j \right)_x \frac{\partial W_x^{(0)}}{\partial a_x} + \left(\vec{u}_{n_x n_y + 10}^j - \vec{u}_{n_x n_y - 10}^j \right)_y \frac{\partial W_y^{(0)}}{\partial a_y} + \right. \right. \\ & + \left. \left(\vec{u}_{n_x n_y 1}^j - \vec{u}_{n_x n_y 0}^j \right)_z \frac{\partial W_z^{(0)}}{\partial a_z} \right] \alpha_{n_x n_y 0}^+ \alpha_{n_x n_y 0}^- + \\ & + \left[\left(\vec{u}_{n_x + 1 n_y N_z}^j - \vec{u}_{n_x - 1 n_y N_z}^j \right)_x \frac{\partial W_x^{(N)}}{\partial a_x} + \left(\vec{u}_{n_x n_y + 1 N_z}^j - \vec{u}_{n_x n_y - 1 N_z}^j \right)_y \frac{\partial W_y^{(N)}}{\partial a_y} + \right. \\ & \left. \left. + \left(\vec{u}_{n_x n_y N_z}^j - \vec{u}_{n_x n_y N_z - 1}^j \right)_z \frac{\partial W_z^{(N)}}{\partial a_z} \right] \alpha_{n_x n_y N_z}^+ \alpha_{n_x n_y N_z}^- \right\}, \end{aligned} \quad (2.115)$$

$$\begin{aligned}
H_{SS}^{(II)}(j) = & - \sum_{n_x n_y} \left\langle \alpha_{n_x n_y 0}^+ \left\{ \frac{\partial W_x^{(0)}}{\partial a_x} \left[\left(\vec{u}_{n_x + \ln_y 0}^j - \vec{u}_{n_x n_y 0}^j \right)_x \alpha_{n_x + \ln_y 0} - \right. \right. \right. \\
& - \left. \left. \left. \left(\vec{u}_{n_x - \ln_y 0}^j - \vec{u}_{n_x n_y 0}^j \right)_x \alpha_{n_x - \ln_y 0} \right] + \right. \\
& + \frac{\partial W_y^{(0)}}{\partial a_y} \left[\left(\vec{u}_{n_x n_y + 10}^j - \vec{u}_{n_x n_y 0}^j \right)_y \alpha_{n_x n_y + 10} - \right. \\
& - \left. \left. \left. \left(\vec{u}_{n_x n_y - 10}^j - \vec{u}_{n_x n_y 0}^j \right)_y \alpha_{n_x n_y - 10} \right] + \right. \\
& + \frac{\partial W_z^{(0)}}{\partial a_z} \left(\vec{u}_{n_x n_y 1}^j - \vec{u}_{n_x n_y 0}^j \right)_z \alpha_{n_x n_y 1} \Big\} + \\
& + \alpha_{n_x n_y N_z}^+ \left\{ \frac{\partial W_x^{(N)}}{\partial a_x} \left[\left(\vec{u}_{n_x + \ln_y N_z}^j - \vec{u}_{n_x n_y N_z}^j \right)_x \alpha_{n_x + \ln_y N_z} - \right. \right. \\
& - \left. \left. \left(\vec{u}_{n_x - \ln_y N_z}^j - \vec{u}_{n_x n_y N_z}^j \right)_x \alpha_{n_x - \ln_y N_z} \right] + \right. \\
& + \frac{\partial W_y^{(N)}}{\partial a_y} \left[\left(\vec{u}_{n_x n_y + 1 N_z}^j - \vec{u}_{n_x n_y N_z}^j \right)_y \alpha_{n_x n_y + 1 N_z} - \right. \\
& - \left. \left. \left(\vec{u}_{n_x n_y - 1 N_z}^j - \vec{u}_{n_x n_y N_z}^j \right)_y \alpha_{n_x n_y - 1 N_z} \right] + \right. \\
& + \left. \left. \left. \frac{\partial W_z^{(N)}}{\partial a_z} \left(\vec{u}_{n_x n_y N_z}^j - \vec{u}_{n_x n_y - 1 N_z}^j \right)_z \alpha_{n_x n_y N_z - 1} \right\} \right\rangle, \tag{2.116}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_{SV}^{(I)}(j) = & \sum_{n_x n_y} \left\{ \left[\left(\vec{u}_{n_x + \ln_y 1}^j - \vec{u}_{n_x - \ln_y 1}^j \right)_x \frac{\partial W_x}{\partial a_x} + \left(\vec{u}_{n_x n_y + 11}^j - \vec{u}_{n_x n_y - 11}^j \right)_y \frac{\partial W_y}{\partial a_y} - \right. \right. \\
& - \left. \left. \left(\vec{u}_{n_x n_y 1}^j - \vec{u}_{n_x n_y 0}^j \right)_z \frac{\partial W_z^{(0)}}{\partial a_z} - \left(\vec{u}_{n_x n_y 2}^j - \vec{u}_{n_x n_y 1}^j \right)_z \frac{\partial W_z}{\partial a_z} \right] \alpha_{n_x n_y 1}^+ \alpha_{n_x n_y 1} + \right. \\
& + \left[\left(\vec{u}_{n_x + \ln_y N_z - 1}^j - \vec{u}_{n_x - \ln_y N_z - 1}^j \right)_x \frac{\partial W_x}{\partial a_x} + \right. \\
& + \left. \left(\vec{u}_{n_x n_y + 1 N_z - 1}^j - \vec{u}_{n_x n_y - 1 N_z - 1}^j \right)_y \frac{\partial W_y}{\partial a_y} + \right. \\
& + \left. \left. \left(\vec{u}_{n_x n_y N_z - 1}^j - \vec{u}_{n_x n_y N_z}^j \right)_z \frac{\partial W_z^{(N)}}{\partial a_z} - \right. \right. \\
& - \left. \left. \left(\vec{u}_{n_x n_y N_z - 1}^j - \vec{u}_{n_x n_y N_z - 2}^j \right)_z \frac{\partial W_z}{\partial a_z} \right] \alpha_{n_x n_y N_z - 1}^+ \alpha_{n_x n_y N_z - 1} \right\}, \tag{2.117}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_{SV}^{(II)}(j) = & - \sum_{n_x n_y} \left\langle \alpha_{n_x n_y 1}^+ \left\{ \frac{\partial W_x}{\partial a_x} \left[\left(\vec{u}_{n_x + \ln_y 1}^j - \vec{u}_{n_x n_y 1}^j \right)_x \alpha_{n_x + \ln_y 1} - \right. \right. \right. \\
& - \left. \left. \left. \left(\vec{u}_{n_x - \ln_y 1}^j - \vec{u}_{n_x n_y 1}^j \right)_x \alpha_{n_x - \ln_y 1} \right] + \right. \\
& + \frac{\partial W_y}{\partial a_y} \left[\left(\vec{u}_{n_x n_y + 11}^j - \vec{u}_{n_x n_y 1}^j \right)_y \alpha_{n_x n_y + 11} - \right. \\
& - \left. \left. \left. \left(\vec{u}_{n_x n_y - 11}^j - \vec{u}_{n_x n_y 1}^j \right)_y \alpha_{n_x n_y - 11} \right] + \right. \\
& + \frac{\partial W_z}{\partial a_z} \left(\vec{u}_{n_x n_y 2}^j - \vec{u}_{n_x n_y 1}^j \right)_z \alpha_{n_x n_y 2} - \\
& - \left. \left. \left. \frac{\partial W_z^{(0)}}{\partial a_z} \left(\vec{u}_{n_x n_y 0}^j - \vec{u}_{n_x n_y 1}^j \right)_z \alpha_{n_x n_y 0} \right] + \right. \\
& + \alpha_{n_x n_y N_z - 1}^+ \left\{ \frac{\partial W_x}{\partial a_x} \left[\left(\vec{u}_{n_x + \ln_y N_z - 1}^j - \vec{u}_{n_x n_y N_z - 1}^j \right)_x \alpha_{n_x + \ln_y N_z - 1} - \right. \right. \\
& - \left. \left. \left(\vec{u}_{n_x - \ln_y N_z - 1}^j - \vec{u}_{n_x n_y N_z - 1}^j \right)_x \alpha_{n_x - \ln_y N_z - 1} \right] + \right. \\
& + \frac{\partial W_y}{\partial a_y} \left[\left(\vec{u}_{n_x n_y + 1 N_z - 1}^j - \vec{u}_{n_x n_y N_z - 1}^j \right)_y \alpha_{n_x n_y + 1 N_z - 1} - \right. \\
& - \left. \left. \left(\vec{u}_{n_x n_y - 1 N_z - 1}^j - \vec{u}_{n_x n_y N_z - 1}^j \right)_y \alpha_{n_x n_y - 1 N_z - 1} \right] + \right. \\
& + \frac{\partial W_z}{\partial a_z} \left(\vec{u}_{n_x n_y N_z}^j - \vec{u}_{n_x n_y N_z - 1}^j \right)_z \alpha_{n_x n_y N_z} - \\
& - \left. \left. \left. \frac{\partial W_z}{\partial a_z} \left(\vec{u}_{n_x n_y N_z - 2}^j - \vec{u}_{n_x n_y N_z - 1}^j \right)_z \alpha_{n_x n_y N_z - 2} \right] \right\} , \quad (2.118)
\end{aligned}$$

$$H_{VV}^{(I)} = \sum_{n_x n_y} \sum_{n_z=2}^{N_z-2} \sum_{j\gamma} \frac{\partial W_\gamma}{\partial a_\gamma} \left(\vec{u}_{n+\lambda_\gamma}^j - \vec{u}_{n-\lambda_\gamma}^j \right)_\gamma \alpha_n^+ \alpha_n ; \quad n \equiv (n_x n_y n_z), \quad (2.119)$$

$$\begin{aligned}
H_{VV}^{(II)} = & \sum_{n_x n_y} \sum_{n_z=2}^{N_z-2} \sum_{j\gamma} \frac{\partial W_\gamma}{\partial a_\gamma} \left[\left(\vec{u}_{n+\lambda_\gamma}^j - \vec{u}_{n_\gamma}^j \right)_\gamma \alpha_n^+ \alpha_{n+\lambda_\gamma} + \right. \\
& \left. + \left(\vec{u}_{n-\lambda_\gamma}^j - \vec{u}_{n_\gamma}^j \right)_\gamma \alpha_n^+ \alpha_{n-\lambda_\gamma} \right], \quad n \equiv (n_x n_y n_z). \quad (2.120)
\end{aligned}$$

Као што се види хамилтонијан електрон-фонон интеракције у филму има неколико карактеристичних делова који су наведени у горњим формулама. Видећемо касније да основне доприносе константи електрон-фонон интеракције дају гранични делови укупног хамилтонијана. Да би ово било што очигледније нисмо ни покушавали да их пишемо у краћој форми преко неке посебне симболике. Симболика би била доста компликована и замагљивала би рачун.

Сада можемо да хамилтонијан масивне структуре (2.109) запишемо у импулсном простору (де факто у простору таласних вектора). Прелазак у импулсни простор врши се Фурије-трансформацијом електронских оператора $\alpha_{\vec{n}}(\alpha_{\vec{n}}^+)$ и оператора вектора помераја $\bar{u}_{\vec{n}}$ атома из чвора \vec{n} респективно, на следећи начин:

$$\begin{aligned} \alpha_{n_x n_y n_z} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k_x k_y k_z} \alpha_{k_x k_y k_z} e^{i(n_x a_x k_x + n_y a_y k_y + n_z a_z k_z)}, \\ \left(\bar{u}_{n_x n_y n_z}^j \right)_\gamma &= \sum_{k_x k_y k_z} \sqrt{\frac{\hbar}{2MN_x N_y N_z \omega_j(k_x k_y k_z)}} [\bar{l}_j(k_x k_y k_z)]_\gamma \times \\ &\quad \times \left(b_{j; k_x k_y k_z} + b_{j; -k_x, -k_y, -k_z}^+ \right) e^{i(n_x a_x q_x + n_y a_y q_y + n_z a_z q_z)}. \end{aligned} \quad (2.121)$$

Систем својствених вектора $\bar{l}_j(q_x q_y q_z)$ који одговарају фононској фреквенцији $\omega_j(q_x q_y q_z)$ називају се векторима поларизације. Они задовољавају услов ортогоналности и потпуности:

$$\sum_\gamma \bar{l}_j^{*\gamma}(q_x q_y q_z) \bar{l}_{j'}^{*\gamma}(q_x q_y q_z) = \delta_{jj'}; \quad \sum_\gamma \bar{l}_j^{*\gamma}(q_x q_y q_z) \bar{l}_{j''}^{*\gamma}(q_x q_y q_z) = \delta_{j''}. \quad (2.122)$$

На тај начин хамилтонијан (2.109) се преводи у:

$$\begin{aligned} H_{\text{int}}^{(B)}(j) &= H_{\text{int}}^{(I)}(j) + H_{\text{int}}^{(II)}(j) = 8i\sqrt{\frac{\hbar}{2MN}} \sum_{k_x k_y k_z} \sum_{q_x q_y q_z} \sum_\gamma \frac{\partial W_\gamma}{\partial a_\gamma} \frac{[\bar{l}_j(q_x q_y q_z)]_\gamma}{\sqrt{\omega_j(q_x q_y q_z)}} \times \\ &\quad \times \sin \frac{k_\gamma a_\gamma}{2} \sin \frac{q_\gamma a_\gamma}{2} \sin \frac{(k_\gamma + q_\gamma)a_\gamma}{2} \alpha_{k_x + q_x, k_y + q_y, k_z + q_z}^+ \alpha_{k_x k_y k_z} \left(b_{j; q_x q_y q_z} + b_{j; -q_x, -q_y, -q_z}^+ \right), \\ &\quad N = N_x N_y N_z. \end{aligned} \quad (2.123)$$

Из овог израза видимо да је, поједностављено оператор фононског помака $b_{j; q_x q_y q_z} + b_{j; -q_x, -q_y, -q_z}^+$ везан са $\bar{q} \equiv (q_x q_y q_z)$ -компонентом густине електрона,

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

Наравно, та густина постаје коначна због прерасподеле електрона. Често се пак зависност у константи везе $F_j(\bar{k}, \bar{q})$ (која стоји испред оператора у (2.123)) може занемарити или извршити одговарајућа усредњавања.

Што се тиче филма треба се подсетити да у њему могу да постоје два типа стања и то запреминска и површинска и за електроне и за фононе. Због тога у танком филму постоји више различитих интеракција електрона са фононима и самим тим неколико типова хамилтонијана интеракције који се добијају комбиновањем електронских и фононских оператора за наведена стања. У филму увек постоји интеракција запреминских електрона са запреминским фононима али ако се појављују и површинска електронска и фононска стања онда се интеракције могу комбиновати: површински електрони - површински фонони,

површински електрони - запремински фонони и запремински електрони-површински фонони. Пошто ови хамилтонијани заузимају много простора овде ће бити наведен хамилтонијан интеракције запреминских електрона са запреминским фононима и хамилтонијан интеракције површинских електрона са запреминским фононима.

Да би се добио хамилтонијан интеракције запреминских електрона са запреминским фононима користићемо трансформацију за запреминске електроне из [51] и то у нултој апроксимацији:

$$\alpha_{n_x n_y n_z} = \sum_{k_x k_y} \sum_{\mu=0}^{N_z} (-1)^\mu \sqrt{\frac{2}{N_x N_y (N_z + 1)}} e^{i(n_x a_x k_x + n_y a_y k_y)} \cos \left[\left(n_z + \frac{1}{2} \right) \frac{\pi \mu}{N_z + 1} \right] \alpha_{k_x k_y k_z}, \quad (2.124)$$

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

и израз за атомске помераје представљен преко запреминских фонона (такође узет у нултој апроксимацији) [47]:

$$\begin{aligned} \left(\bar{u}_{n_x n_y n_z}^j \right)_\gamma &= \sum_{q_x q_y} \sum_{\nu=1}^{N_z + 1} (-1)^{n_z} \sqrt{\frac{\hbar}{MN_x N_y (N_z + 2) \omega_j(q_x q_y q_z)}} [\bar{l}_j(q_x q_y q_z)]_\gamma \times \\ &\times \left(b_{j; q_x q_y q_z} + b_{j; -q_x, -q_y, -q_z}^+ \right) e^{i(n_x a_x q_x + n_y a_y q_y)} \sin \left(n_z + \frac{1}{2} \right) \frac{\pi \nu}{N_z + 2} \quad (2.125) \end{aligned}$$

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

У нултој апроксимацији електронска и фононска стања су ортогонална јер се преко њих дијагонализују електронски и фононски хамилтонијани [47], [51]. Што се тиче хамилтонијана интеракције, замена (2.124) и (2.125) у (2.114) (у (2.114) је узето $W^{(0)}, W^{(N)} \approx W$) није довела до кронекеровог симбола по z -компонентама таласног вектора, што значи да импулс није одржан.

Због тога је коришћена хомогена апроксимација [3], која се састоји у следећем:

$$\begin{aligned} &\sum_{n_z k_z q_z p_z} f(n_z, k_z, q_z, p_z) \alpha_{k_x + q_x, k_y + q_y, p_z}^+ \alpha_{k_x k_y k_z} b_{q_x q_y q_z} \approx \\ &\approx \sum_{n_z k_z q_z} f(n_z, k_z, q_z, k_z + q_z) \alpha_{k_x + q_x, k_y + q_y, k_z + q_z}^+ \alpha_{k_x k_y k_z} b_{q_x q_y q_z}, \quad (2.126) \end{aligned}$$

што значи да су задржани само чланови у којима се одржава имплус. Веома важно је уочити да атомски померај (2.125) у филму мења знак од слоја до слоја и због тога суме по слојевима у којој се он јавља као фактор није пропорционална броју слојева, како би то било кад знак не би био алтернативан. Пошто знак помераја у масивној структури није алтернативан, допринос од сумирања по z -правцу је пропорционалан броју слојева N_z . Због тога се може наслутити да је интеракција запреминских електрона са запреминским фононима мање изражена у филму него у масивној структури.

Горње тврђење се може релативно лако и доказати налажењем следеће суме:

$$\sum(\alpha, \beta, \gamma, N_z) = \sum_{n_z=0}^{N_z} (-1)^{n_z} \sin(n_z + 1)\alpha \cos\left(n_z + \frac{1}{2}\right)\beta \cos\left(n_z + \frac{1}{2}\right)\gamma . \quad (2.127)$$

Применом формуле:

$$\sin x \sin y \sin z = \frac{1}{4} [\sin(x+y+z) + \sin(x+y-z) + \sin(x-y+z) + \sin(x-y-z)] \quad (2.128)$$

горња сума се може написати као збир четири суме. Коришћењем формуле:

$$\sum_{n=0}^N (-1)^n \sin(nX + Y) = \frac{1}{2 \cos \frac{X}{2}} \left[\sin\left(Y - \frac{X}{2}\right) + (-1)^N \sin\left(XN + Y + \frac{X}{2}\right) \right] \quad (2.129)$$

за сваку од те четири суме коначно се за (2.127) добија следећи израз:

$$\begin{aligned} \sum(\alpha, \beta, \gamma, N) &= \frac{1}{8 \cos \frac{\alpha+\beta+\gamma}{2}} \left[\sin \frac{\alpha}{2} + (-1)^N \sin \left((N+1)(\alpha+\beta+\gamma) + \frac{\alpha}{2} \right) \right] + \\ &+ \frac{1}{8 \cos \frac{\alpha+\beta-\gamma}{2}} \left[\sin \frac{\alpha}{2} + (-1)^N \sin \left((N+1)(\alpha+\beta-\gamma) + \frac{\alpha}{2} \right) \right] + \\ &+ \frac{1}{8 \cos \frac{\alpha-\beta+\gamma}{2}} \left[\sin \frac{\alpha}{2} + (-1)^N \sin \left((N+1)(\alpha-\beta+\gamma) + \frac{\alpha}{2} \right) \right] + \\ &+ \frac{1}{8 \cos \frac{\alpha-\beta-\gamma}{2}} \left[\sin \frac{\alpha}{2} + (-1)^N \sin \left((N+1)(\alpha-\beta-\gamma) + \frac{\alpha}{2} \right) \right]. \end{aligned} \quad (2.130)$$

Нумеричком анализом последње формуле показано је да је тај израз практично увек различит од нуле ако важи следећа веза:

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

док је у осталим случајевима занемарив и готово увек једнак нули. Ово може послужити као доказ и потврда оправданости горе уведене хомогене апроксимације.

После замене (2.124) и (2.125) у (2.114) хамилтонијан електрон-фонон интеракције у филму се може записати као:

$$H_{\text{int}}^{(F)}(j) = H_{SS}^{(F)}(j) + H_{SV}^{(F)}(j) + H_{VV}^{(F)}(j). \quad (2.131)$$

Као што се види хамилтонијан је нешто преструктуриран у односу на форму коју има у конфигурационој презентацији, али је такво преструктуирање целисходно због процене доприноса поједињих делова из (2.131).

Коначан израз за хамилтонијан електрон-фонон интеракције нултог слоја може бити записан на следећи начин:

$$H_{SS}^{(F)}(j) = H_{SS}^{(1)}(j) + H_{SS}^{(2)}(j), \quad n_z = 0, \quad (2.132)$$

где је:

$$\begin{aligned} H_{SS}^{(1)}(j) &= 16i \sqrt{\frac{\hbar}{MN_x N_y (N_z + 1)^3}} \frac{N_z + 1}{N_z + 2} \sum_{k_x k_y k_z} \sum_{q_x q_y q_z} \sum_{\gamma} \frac{\partial W^{(0)}}{\partial a_z} \frac{[\bar{l}_j(q_x q_y q_z)]_{\gamma}}{\sqrt{\omega_j(q_x q_y q_z)}} \times \\ &\times (-1)^{\nu} \sin \frac{k_y a_{\gamma}}{2} \sin \frac{q_y a_{\gamma}}{2} \sin \frac{(k_y + q_y)a_{\gamma}}{2} \sin a_z q_z \cos \frac{a_z k_z}{2} \cos \frac{(k_z + q_z)a_z}{2} \times \\ &\times \alpha_{k_x + q_x, k_y + q_y, k_z + q_z}^+ \alpha_{k_x k_y k_z} \left(b_{j; q_x q_y q_z} + b_{j; -q_x, -q_y, q_z}^+ \right), \end{aligned} \quad (2.133)$$

односно:

$$\begin{aligned} H_{SS}^{(2)}(j) &= -8 \sqrt{\frac{\hbar}{MN_x N_y (N_z + 1)^3}} \frac{N_z + 1}{N_z + 2} \sum_{k_x k_y k_z} \sum_{q_x q_y q_z} \frac{\partial W^{(0)}}{\partial a_z} \frac{[\bar{l}_j(q_x q_y q_z)]_z}{\sqrt{\omega_j(q_x q_y q_z)}} \times \\ &\times (-1)^{\nu} \sin a_z k_z \sin \frac{a_z k_z}{2} \sin \frac{3a_z q_z}{2} \cos \frac{a_z q_z}{2} \cos \frac{(k_z + q_z)a_z}{2} \times \\ &\times \alpha_{k_x + q_x, k_y + q_y, k_z + q_z}^+ \alpha_{k_x k_y k_z} \left(b_{z; q_x q_y q_z} + b_{j; -q_x, -q_y, q_z}^+ \right). \end{aligned} \quad (2.134)$$

Уведене су следеће ознаке:

$$\gamma = (x, y) \quad \text{и} \quad \sum_{q_z} \leftrightarrow \sum_{\nu=1}^{N_z+1}; \quad \alpha_z q_z = \frac{\pi \nu}{N_z + 2}, \quad \nu = 1, 2, \dots, N_z + 1. \quad (2.135)$$

Хамилтонијан за слој $n_z = N_z$, добија се из хамилтонијана за $n_z = 0$ тако што се фактор $(-1)^{\nu}$ за $n_z = 0$, замењује фактором $(-1)^{\nu + N_z + 1}$ за $n_z = N_z$. Наравно $\frac{\partial W^{(0)}}{\partial a_{\gamma}} \rightarrow \frac{\partial W^{(N)}}{\partial a_{\gamma}}$; $\gamma = (x, y, z)$.

Сличном процедуром, добијамо хамилтонијан за слој $n_z = 1$. Он може бити написан као:

$$H_{SV}^{(F)}(j) = H_{SV}^{(1)}(j) + H_{SV}^{(2)}(j), \quad n_z = 1 \quad (2.136)$$

при чему је:

$$\begin{aligned} H_{SV}^{(1)}(j) &= 16i \sqrt{\frac{\hbar}{MN_x N_y (N_z + 1)^3}} \frac{N_z + 1}{N_z + 2} \sum_{k_x k_y k_z} \sum_{q_x q_y q_z} \sum_{\gamma} \frac{\partial W^{(0)}}{\partial a_{\gamma}} \frac{[\bar{l}_j(q_x q_y q_z)]_{\gamma}}{\sqrt{\omega_j(q_x q_y q_z)}} \times \\ &\times (-1)^{\nu+1} \sin \frac{k_y a_{\gamma}}{2} \sin \frac{q_y a_{\gamma}}{2} \sin \frac{(k_y + q_y)a_{\gamma}}{2} \sin 2a_z q_z \cos \frac{3a_z k_z}{2} \cos \frac{3(k_z + q_z)a_z}{2} \times \\ &\times \alpha_{k_x + q_x, k_y + q_y, k_z + q_z}^+ \alpha_{k_x k_y k_z} \left(b_{j; q_x q_y q_z} + b_{j; -q_x, -q_y, q_z}^+ \right), \end{aligned} \quad (2.137)$$

И

$$H_{SV}^{(2)}(j) = -8 \sqrt{\frac{\hbar}{MN_x N_y (N_z+1)^3}} \frac{N_z+1}{N_z+2} \sum_{k_x k_y k_z} \sum_{q_x q_y q_z} \frac{\partial W_z}{\partial a_z} \frac{[\bar{l}_j(q_x q_y q_z)]_z}{\sqrt{\omega_j(q_x q_y q_z)}} \times \\ \times (-1)^{v+1} \sin a_z k_z \sin \frac{a_z k_z}{2} \cos \frac{3(k_z + q_z) a_z}{2} \left[\frac{\partial W_z^{(0)}}{\partial a_z} \sin \frac{3a_z q_z}{2} \cos \frac{a_z q_z}{2} + \right. \\ \left. + \frac{\partial W_z}{\partial z} 2 \sin \frac{5a_z q_z}{2} \cos a_z k_z \cos \frac{a_z q_z}{2} \right] \alpha_{k_x+q_x, k_y+q_y, k_z+q_z}^+ \alpha_{k_x k_y k_z} \left(b_{z; q_x q_y q_z} + b_{j; -q_x, -q_y, q_z}^+ \right). \quad (2.138)$$

Да би се добио хамилтонијан интеракције за слој $n_z = N_z - 1$ треба у формулама (2.137) и (2.138) заменити фактор $(-1)^{v+1}$ са фактором $(-1)^{v+1+N_z}$ а $\frac{\partial W_\gamma^{(0)}}{\partial a_\gamma} \rightarrow \frac{\partial W_\gamma^{(N)}}{\partial a_\gamma}$; $\gamma = (x, y, z)$.

Аналогно се за слојеве $n_z = 2, 3, \dots, N_z - 2$ добија следећа структура хамилтонијана електрон-фонон интеракције:

$$H_{VV}^{(F)}(j) = H_{VV}^{(1)}(j) + H_{VV}^{(2)}(j), \quad n_z = 2, 3, \dots, N_z - 2, \quad (2.139)$$

где је

$$H_{VV}^{(1)}(j) = 16i \sqrt{\frac{\hbar}{MN_x N_y (N_z+1)^3}} \frac{N_z+1}{N_z+2} \sum_{k_x k_y k_z} \sum_{q_x q_y q_z} \sum_{\gamma} \frac{\partial W_\gamma}{\partial a_\gamma} \frac{[\bar{l}_j(q_x q_y q_z)]_\gamma}{\sqrt{\omega_j(q_x q_y q_z)}} \times \\ \times (-1)^v \sum_0 \alpha_{k_x+q_x, k_y+q_y, k_z+q_z}^+ \alpha_{k_x k_y k_z} \left(b_{j; q_x q_y q_z} + b_{j; -q_x, -q_y, q_z}^+ \right) \quad (2.140)$$

и

$$H_{VV}^{(2)}(j) = 8 \sqrt{\frac{\hbar}{MN_x N_y (N_z+1)^3}} \frac{N_z+1}{N_z+2} \sum_{k_x k_y k_z} \sum_{q_x q_y q_z} \frac{\partial W_z}{\partial a_z} \frac{[\bar{l}_z(q_x q_y q_z)]_z}{\sqrt{\omega_j(q_x q_y q_z)}} \times \\ \times (-1)^v \left(\sum_1 \cos \frac{a_z q_z}{2} - \sum_2 \sin a_z q_z - \sum_3 \cos \frac{a_z q_z}{2} \right) \times \\ \times \alpha_{k_x+q_x, k_y+q_y, k_z+q_z}^+ \alpha_{k_x k_y k_z} \left(b_{j; q_x q_y q_z} + b_{j; -q_x, -q_y, q_z}^+ \right). \quad (2.141)$$

Суме $\sum_i \equiv \sum_i(k_z, q_z, N_z)$, ($i = 0, 1, 2, 3$) у горњим формулама налазе се аналогно пређашњем случају. Оне су након елеминисања N_z следећег облика:

$$\sum_0 = \frac{1}{8 \cos a_z (k_z + q_z)} \left[\sin \left(4k_z + \frac{9}{2}q_z \right) a_z + (-1)^{N_z+1} \sin \left(4k_z + \frac{11}{2}q_z \right) a_z \right] + \\ + \frac{1}{8 \cos a_z q_z} \left[\sin \left(\frac{9}{2}a_z q_z \right) + (-1)^{N_z+1} \sin \frac{11}{2}a_z q_z \right] - \\ - \frac{1}{8 \cos a_z k_z} \left[\sin \left(4a_z k_z - \frac{a_z q_z}{2} \right) + (-1)^{N_z+1} \sin \left(4k_z + \frac{9}{2}q_z \right) a_z \right] + \\ + \frac{1}{8} \left[1 + (-1)^{N_z} \right] \sin \frac{a_z q_z}{2}, \quad (2.142)$$

$$\begin{aligned}
\sum_1 = & \frac{1}{8 \cos a_z (k_z + q_z)} \left[\sin(5(k_z + q_z)a_z) + (-1)^{N_z+1} \sin(3k_z + 5q_z)a_z \right] + \\
& + \frac{1}{8 \cos a_z q_z} \left[\sin(5q_z - k_z)a_z + (-1)^{N_z+1} \sin(k_z + 5q_z)a_z \right] + \\
& + \frac{1}{8 \cos a_z k_z} \left[\sin(q_z - 5k_z)a_z + (-1)^{N_z} \sin(3k_z + q_z)a_z \right] + \\
& + \frac{1}{8} \left[1 + (-1)^{N_z} \right] \sin(k_z + q_z)a_z,
\end{aligned} \tag{2.143}$$

$$\begin{aligned}
\sum_2 = & \frac{1}{8 \cos a_z (k_z + q_z)} \left[\sin \left(4k_z + \frac{9}{2}q_z \right) a_z + (-1)^{N_z} \cos \frac{5}{2}a_z q_z \right] + \\
& + \frac{1}{8 \cos a_z q_z} \left[\cos \left(\frac{9}{2}a_z q_z \right) + (-1)^{N_z} \cos \frac{11}{2}a_z q_z \right] + \\
& + \frac{1}{8 \cos a_z k_z} \left[\sin \left(4k_z - \frac{q_z}{2} \right) a_z + (-1)^{N_z+1} \cos \left(4k_z + \frac{q_z}{2} \right) a_z \right] + \\
& + \frac{1}{8} \left[1 + (-1)^{N_z} \right] \cos \frac{a_z q_z}{2},
\end{aligned} \tag{2.144}$$

$$\begin{aligned}
\sum_3 = & \frac{1}{8 \cos a_z (k_z + q_z)} \left[\sin(3k_z + 4q_z)a_z + (-1)^{N_z+1} \sin(5k_z + 6q_z)a_z \right] + \\
& + \frac{1}{8 \cos a_z q_z} \left[\sin(k_z + 4q_z)a_z + (-1)^{N_z+1} \sin(6q_z - k_z)a_z \right] - \\
& - \frac{1}{8 \cos a_z k_z} \left[\sin 3k_z a_z + (-1)^{N_z+1} \sin 5a_z k_z \right] - \\
& - \frac{1}{8} \left[1 + (-1)^{N_z} \right] \sin a_z k_z.
\end{aligned} \tag{2.145}$$

2.3. Осцилаторно понашање својства танких филмова

У низу радова, наводе се емпириске чињенице да велики број карактеристика танких филмова осцилује са променом њихове дебљине [43], [57], [58], [59]. Треба одмах напоменути да поменуто осциловање није примећено у чистим металним филмовима (концентрација око један електрон по атому) већ код проводних материјала (интерметална једињења, полуметали, полуправоводници и др.) код којих је концентрација слободних електрона мања од један. У свим поменутим радовима говори се о осцилаторној зависности транспортних и оптичких својства од дебљине филма али се не формулише теорија која би објаснила осцилације термодинамичких својстава.

У овом параграфу покушаћемо да пружимо теоријско објашњење за осциловање Фермијеве енергије и електронске специфичне топлоте танких филмова. У том циљу одредићемо граничну вредност концентрације проводних електрона n_G при којој се појављују осцилације. Поред тога испитаћемо утицај граничних услова на термодинамичка својства танких филмова при $n \leq n_G$, као и зависност периода осциловања термодинамичких карактеристика од концентрације електрона.

За израчунавање Фермијеве енергије ћемо користити израз:

$$\varepsilon_F = \frac{1}{\nu_m} \left[2\pi(N_z + 1) \frac{\mathcal{N}_{el}}{\mathcal{N}_{at}} + \sum_{\nu=1}^{\nu_m} \Delta_\nu \right] \quad (2.146)$$

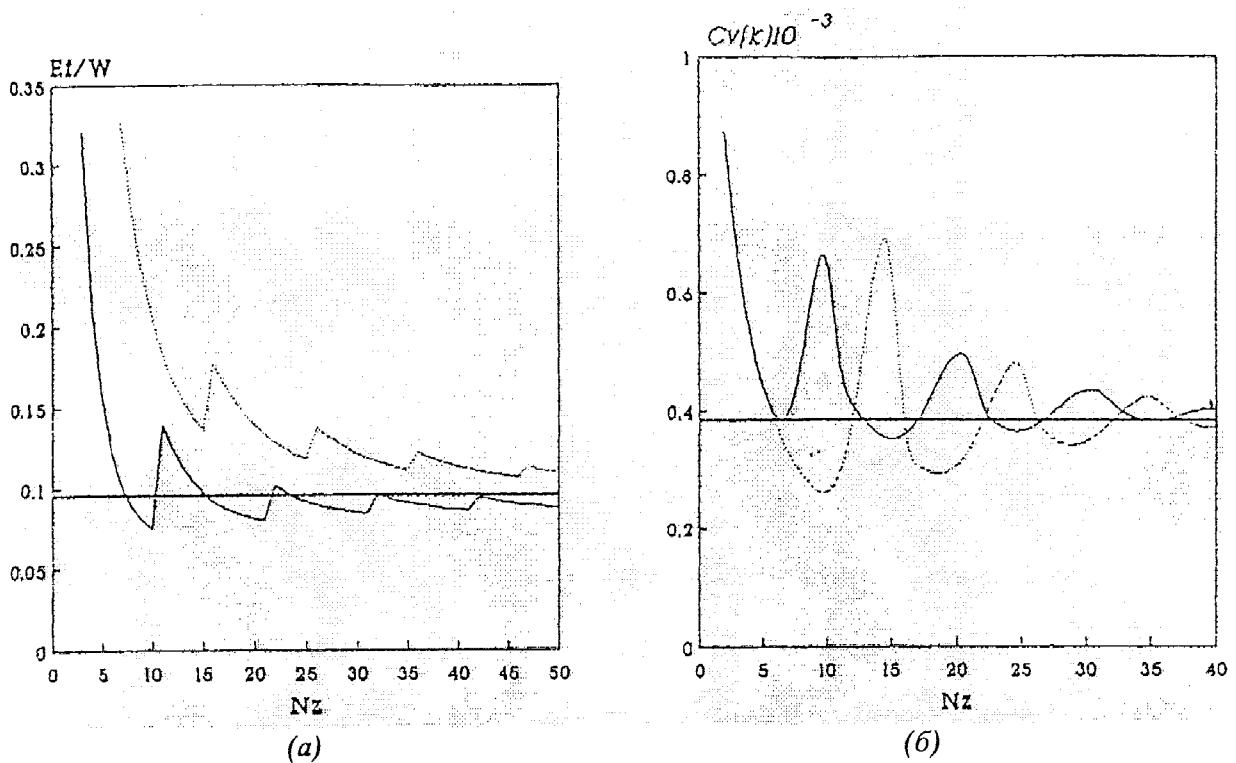
у коме ν_m означава највишу попуњену електронску подзону. Код метала ова подзона се поклапа са бројем слојева, док код материјала са малом електронском концентрацијом ν_m је мање од броја слојева. Само у овом случају ($\nu_m \leq N_z$), као што ћемо видети, долази до осциловања Фермијеве енергије са повећањем дебљине филма. Поред тога, Ферми енергија зависи и од избора граничних услова. Може се показати да до осциловања долази ако је за Дирихлеове услове концентрација електрона мања од:

$$n_G^D = \frac{\pi}{12} \frac{N_z(4N_z + 5)}{(N_z + 2)^2}, \quad (2.147)$$

док за Нојманове услове граничних концентрација износи:

$$n_G^D = \frac{\pi}{12} \frac{N_z(4N_z^2 + 3N_z - 1)}{(N_z + 1)^3}. \quad (2.148)$$

Види се да је при Дирихлеовим условима гранична вредност концентрације нешто нижа од оне која следи из Нојманових услова $n_G^D < n_G^N$.



Слика 2 (а) Осцилације Фермијеве енергије и (б) специфичне топлоте при Нојмановим (шачкастима линија) и Дирихлеовим (шанка линија) граничним условима. Пуне линије представљају балковску вредност Фермијеве енергије

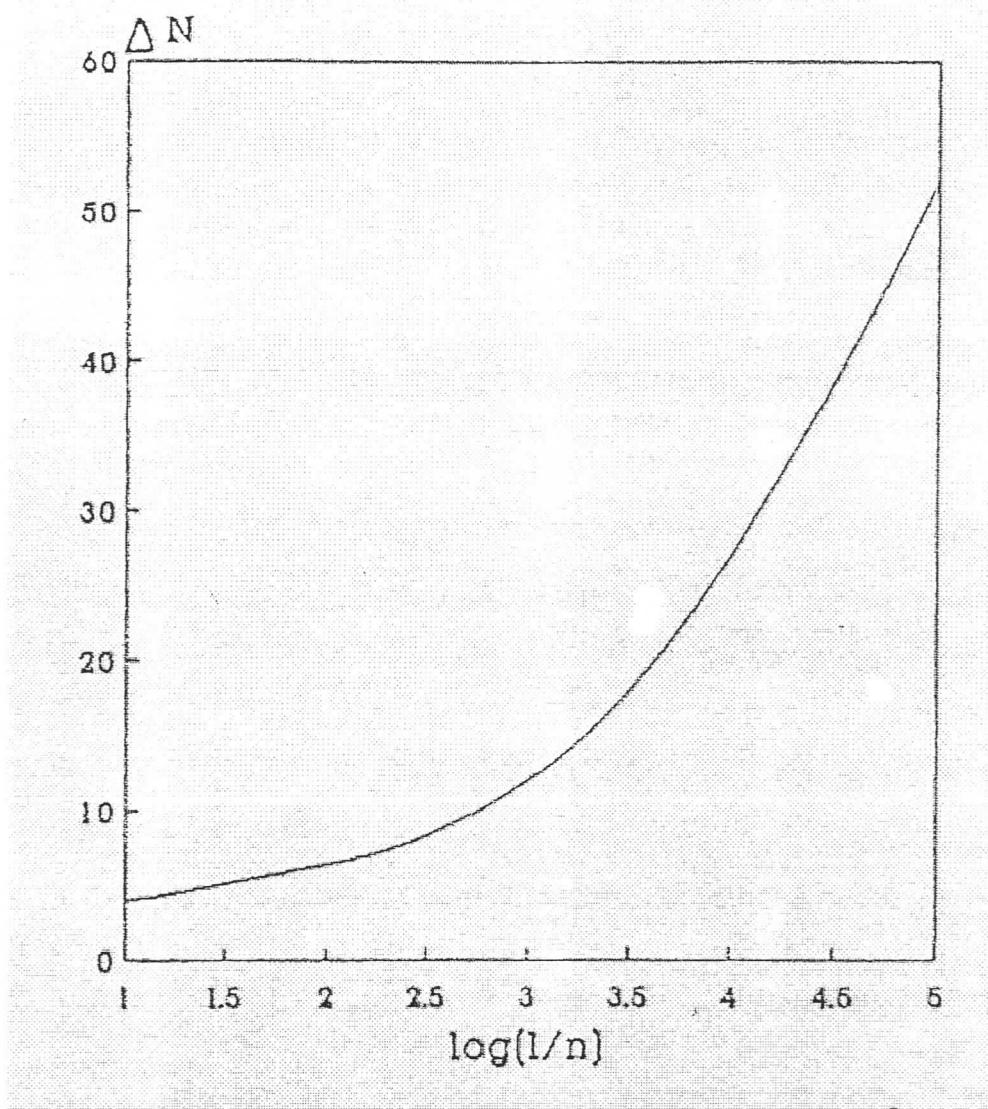
Резултати нумеричке анализе израза (2.146) приказани су на слици 2 (а) при концентрацији од 10^{-3} слободних електрона по атому, када је $\varepsilon_F = 0,096$ за масивни кристал. Са слике се види да Дирихлеов услов води на нешто већу Фермијеву енергију али је период осцилација исти као у случају Нојманових граничних услова.

Осим Фермијеве енергије, нумерички је рачуната и специфична топлота електронског гаса помоћу релације:

$$C_V[k_B] = \frac{1}{4\pi(N_z + 1)} \sum_{\nu=1}^{N_z} \int_{(\Delta_\nu - \varepsilon_F)/t}^{\infty} \frac{x(\varepsilon_F + tx)dx}{(e^x + 1)(e^{-x} + 1)}. \quad (2.149)$$

Пошто специфична топлота зависи од Фермијеве енергије, осцилаторно понашање ове величине преноси се и на специфичну топлоту чији је график приказан на слици 2 (б) при концентрацији електрона од 10^{-3} и на температури $t = 10^{-2}$, када је за масивни кристал $C_V = 0,38k_B$. Резултати са ове слике показују да период осцилација специфичне топлоте не зависи од граничних услова.

На крају је испитана и зависност периода осциловања ΔN од концентрације електрона слике 3. Са слике се види да период осциловања расте при смањењу концентрације електрона.



Слика 3

Зависност њериода осциловања од концентрације електрона $n \equiv N_{el} / N_{at}$

На основу изложене анализе може се извести следећи закључак. Осцилаторно понашање термодинамичких карактеристика танких филмова последица је недовољне попуњености подзона електричног квантовања. Према теоријској анализи која је овде дата, осциловање се јавља услед попуњавања већег броја подзона приликом повећања дебљине филма.

3. МИКРОТЕОРИЈСКИ ПРИЛАЗ У АНАЛИЗИ КВАНТНИХ ЖИЦА

3.1. Досадашња истраживања квантних жица

Последњих година се доста ради на испитивању особина тзв. квантних жица.¹ То су структуре код којих дужина знатно премашује њихову дебљину. У низу радова [60]-[73] испитиване су особине оваквих структура, најчешће су анализирани узорци Галијум арсената (G_aA_s) зато што његови узорци највише одговарају горњој дефиницији квантних жица. Ток ових анализа је следећи. Дефинише се дводимензионална потенцијална ѡама у некој од координатних равни и претпостави се да је по нормали на ову раван структура трансляционо инваријантна. Таласна функција честице (или квазичестице) у ѡами решава се у континуалној апроксимацији. Најчешће се узимају правоугаоне и кружне ѡаме, а параметри ѡаме се бирају тако да се теорија максимално усклади са постојећим експериментом. Решавање Шредингерове једначине за ѡаму у континуалној апроксимацији на известан начин чини све поменуте прилазе полуфеноменолошким и за кристале су они добри само у случају веома дугих таласа. Задавање граничних услова у континууму релативно огрубљује реалну ситуацију у којој се мењају међуатомске интеракције у граничним слојевима. Познато је из теорије танких филмова [47], [76], [77] да су ови гранични услови веома значајни за целокупно понашање система.

Овде ће бити предложен приступ у коме су у добро мери елиминисани поменути недостаци досадашњих анализа квантних жица. Посматраће се структура „исечена“ дуж правца Y и Z из идеалног кристала. Број атома у правцима Y и Z је релативно мали (реда 10) док је дуж X правца структура практично бесконачна (број атома у овом правцу је реда 10^8). Оваква анализа је уопштавање процедуре којом се испитују танки филмови само што у датом случају постоје четири граничне површине, што знатно повећава број граничних једначина. У оваквом прилазу рачун је знатно компликованији јер се уместо са диференцијалним ради са диференцним једначинама, а и број граничних услова је велики, па се може поставити питање целисходности оваквог приступа. Оправдање за овакав приступ састоји се у чињеници да у оваквом приступу теорија важи за све таласне дужине, а гранични услови се могу прецизно задати за сваки слој и сваку ивицу структуре.

Овде ће бити постављен скуп основних једначина за структуру која је коначна у Y и Z правцу. Једначине ће бити формулисане за систем електрона у Хабардовом моделу, за екситоне, за спинске таласе и за фероелектрична побуђења. За електронски систем биће анализирани неки екстремно прости случајеви као што су систем од три и четири нити. Систем од три нити може бити интересантан јер је сличан Скотовом моделу [78], [79] за α -протеине.

3.2. Формирање основног система једначина

Уз просте кубне структуре „исечен“ је део чија дебљина и висина износе неколико слојева, док му је дужина практично бесконачна. Јсечени део представља квантну жицу.

Овде ћемо формирати основне једначине преко којих се одређује функција стања елементарних побуђења у жици. Једначине ћемо формирати за општи случај (Оне треба да обухватају електронска, екситонска, спинска и фероелектрична побуђења).

Хамилтонијан се у општем случају може написати као:

$$\hat{H} = \sum_{\substack{n_x n_y n_z \\ m_x m_y m_z}} \hat{T}_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z}$$

$$\hat{T}_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z} = D_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z} \alpha^{+}_{n_x n_y n_z} \alpha_{n_x n_y n_z} +$$

$$+ S_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z} \alpha^{+}_{n_x n_y n_z} \alpha_{m_x m_y m_z}$$

$$n_x \in \left(-\frac{N_x}{2}, \frac{N_x}{2} \right) ; \quad N_x \sim 10^8$$

$$n_y \in (0, N_y) ; \quad N_y \sim 5 - 10$$

$$n_z \in (0, N_z) ; \quad N_z \sim 5 - 10 \quad (3.1)$$

Оператори α^+ и α , креирају и анихилирају елементарна побуђења, док су D и S матрични елементи који карактеришу пренос елементарних побуђења. За разне типове елементарних ексцитација могу се специфицирати D и S , али ће то бити учињено касније, када буде формиран општи систем једначина.

Ако се ограничимо апроксимацијом најближих суседа, хамилтонијан (3.1) постаје:

$$\hat{H} = \sum_{n_x n_y n_z} (\hat{T}_{n_x n_y n_z; n_x + 1, n_y n_z} + \hat{T}_{n_x n_y n_z; n_x - 1, n_y n_z} +$$

$$+ \hat{T}_{n_x n_y n_z; n_x n_y + 1, n_z} + \hat{T}_{n_x n_y n_z; n_x n_y - 1, n_z} + \hat{T}_{n_x n_y n_z; n_x n_y n_z + 1} +$$

$$+ \hat{T}_{n_x n_y n_z; n_x n_y n_z - 1}) \quad (3.2)$$

У хамилтонијану (3.2) треба издвојити чланове који одговарају граничним површинама и граничним ивицама жице, јер се на границама мењају матрични елементи D и S . Они остају непромењени само за унутрашње слојеве жице.

Када се изврши поменуто разбијање хамилтонијана на делове испоставља се да (3.2) прелази у:

$$\hat{H} = \sum_{\mu=1}^{25} \hat{h}_\mu \quad (3.3)$$

где су $\hat{h}_1, \dots, \hat{h}_{24}$ делови хамилтонијана који одговарају границама, док \hat{h}_{25} одговара унутрашњости жице где се утицај граничних услова на матричне елементе губи.

Листа хамилтонијана је следећа:

$$\hat{h}_1 = \sum_{n_x} (\hat{T}_{n_x 00; n_x+1, 00} + \hat{T}_{n_x 00; n_x-1, 00} + \hat{T}_{n_x 00; n_x 10} + \hat{T}_{n_x 0, 0; n_x 0, 1}),$$

$$\begin{aligned} \hat{h}_2 = & \sum_{n_x} (\hat{T}_{n_x N_y N_z; n_x+1, N_y N_z} + \hat{T}_{n_x N_y N_z; n_x-1, N_y N_z} + \\ & + \hat{T}_{n_x N_y N_z; n_x N_y-1, N_z} + \hat{T}_{n_x N_y N_z; n_x N_y, 1}), \end{aligned}$$

$$\hat{h}_3 = \sum_{n_x} (\hat{T}_{n_x N_y 0; n_x+1, N_y 0} + \hat{T}_{n_x N_y 0; n_x-1, N_y 0} + \hat{T}_{n_x N_y 0; n_x, N_y-1, 0} + \hat{T}_{n_x N_y 0; n_x, N_y, 1}),$$

$$\hat{h}_4 = \sum_{n_x} (\hat{T}_{n_x 0 N_z; n_x+1, 0 N_z} + \hat{T}_{n_x 0 N_z; n_x-1, 0 N_z} + \hat{T}_{n_x 0 N_z; n_x 1 N_z} + \hat{T}_{n_x 0 N_z; n_x 0 N_z}),$$

$$\hat{h}_5 = \sum_{n_x} (\hat{T}_{n_x 10; n_x+1, 10} + \hat{T}_{n_x 10; n_x-1, 10} + \hat{T}_{n_x 10; n_x 20} + \hat{T}_{n_x 10; n_x 11} + \hat{T}_{n_x 10; n_x 00}),$$

$$\begin{aligned} \hat{h}_6 = & \sum_{n_x} (\hat{T}_{n_x N_y-1, 0; n_x+1, N_y-1, 0} + \hat{T}_{n_x N_y-1, 0; n_x-1, N_y-1, 0} + \hat{T}_{n_x N_y-1, 0; n_x N_y-1, 1} + \\ & + \hat{T}_{n_x N_y-1, 0; n_x N_y 0} + \hat{T}_{n_x N_y-1, 0; n_x N_y-2, 0}), \end{aligned}$$

$$\hat{h}_7 = \sum_{n_x} (\hat{T}_{n_x 01; n_x+1, 10} + \hat{T}_{n_x 01; n_x-1, 01} + \hat{T}_{n_x 01; n_x 00} + \hat{T}_{n_x 01; n_x 11} + \hat{T}_{n_x 01; n_x 02}),$$

$$\begin{aligned} \hat{h}_8 = & \sum_{n_x} (\hat{T}_{n_x 0 N_z-1; n_x+1, 0 N_z-1} + \hat{T}_{n_x 0 N_z-1; n_x-1, 0 N_z-1} + \hat{T}_{n_x 0 N_z-1; n_x 0 N_z} + \\ & + \hat{T}_{n_x 0 N_z-1; n_x 1 N_z-1} + \hat{T}_{n_x 0 N_z-1; n_x 0 N_z-2}), \end{aligned}$$

$$\hat{h}_9 = \sum_{n_x} (\hat{T}_{n_x 0 N_z; n_x+1, 1 N_z} + \hat{T}_{n_x 1 N_z; n_x-1, 1 N_z} + \hat{T}_{n_x 1 N_z; n_x 0 N_z} + \hat{T}_{n_x 1 N_z; n_x 1 N_z-1} + \hat{T}_{n_x 1 N_z; n_x 2 N_z}),$$

$$\begin{aligned}
\hat{h}_{10} &= \sum_{n_x} (\hat{T}_{n_x N_y -1, N_z; n_x +1, N_y -1, N_z} + \hat{T}_{n_x N_y -1, N_z; n_x -1, N_y -1, N_z} + \hat{T}_{n_x N_y -1, N_z; n_x N_y -1, N_z -1} + \\
&\quad + \hat{T}_{n_x N_y -1, N_z; n_x N_y N_z} + \hat{T}_{n_x N_y -1, N_z; n_x N_y -2, N_z}), \\
\hat{h}_{11} &= \sum_{n_x} (\hat{T}_{n_x N_y 1; n_x +1, N_y 1} + \hat{T}_{n_x N_y 1; n_x -1, N_y 1} + \hat{T}_{n_x N_y 1; n_x N_y 0} + \hat{T}_{n_x N_y 1; n_x N_y -1, 1} + \hat{T}_{n_x N_y 1; n_x N_y 2}), \\
\hat{h}_{12} &= \sum_{n_x} (\hat{T}_{n_x N_y N_z -1; n_x +1, N_y N_z -1} + \hat{T}_{n_x N_y N_z -1; n_x -1, N_y N_z -1} + \hat{T}_{n_x N_y N_z -1; n_x N_y -1, N_z -1} + \\
&\quad + \hat{T}_{n_x N_y N_z -1; n_x N_y N_z} + \hat{T}_{n_x N_y N_z -1; n_x N_y N_z -2}), \\
\hat{h}_{13} &= \sum_{n_x} (\hat{T}_{n_x 11; n_x +1, 11} + \hat{T}_{n_x 11; n_x -1, 11} + \hat{T}_{n_x 11; n_x 21} + \hat{T}_{n_x 11; n_x 01} + \hat{T}_{n_x 11; n_x 12} + \hat{T}_{n_x 11; n_x 10}), \\
\hat{h}_{14} &= \sum_{n_x} (\hat{T}_{n_x, N_y -1, 1; n_x +1, N_y -1, 1} + \hat{T}_{n_x, N_y -1, 1; n_x -1, N_y -1, 1} + \hat{T}_{n_x, N_y -1, 1; n_x N_y 1} + \\
&\quad + \hat{T}_{n_x, N_y -1, 1; n_x N_y -2, 1} + \hat{T}_{n_x, N_y -1, 1; n_x N_y -1, 2} + \hat{T}_{n_x, N_y -1, 1; n_x N_y -1, 0}), \\
\hat{h}_{15} &= \sum_{n_x} (\hat{T}_{n_x 1, N_z -1; n_x +1, 1 N_z -1} + \hat{T}_{n_x 1, N_z -1; n_x -1, 1 N_z -1} + \hat{T}_{n_x 1, N_z -1; n_x 2 N_z -1} + \\
&\quad + \hat{T}_{n_x 1, N_z -1; n_x 0 N_z -1} + \hat{T}_{n_x 1, N_z -1; n_x 1 N_z} + \hat{T}_{n_x 1, N_z -1; n_x 1 N_z -2}), \\
\hat{h}_{16} &= \sum_{n_x} (\hat{T}_{n_x N_y -1, N_z -1; n_x +1, N_y -1, N_z -1} + \hat{T}_{n_x N_y -1, N_z -1; n_x -1, N_y -1, N_z -1} + \hat{T}_{n_x N_y -1, N_z -1; n_x N_y N_z -1} + \\
&\quad + \hat{T}_{n_x N_y -1, N_z -1; n_x N_y -2, N_z -1} + \hat{T}_{n_x N_y -1, N_z -1; n_x N_y -1, N_z} + \hat{T}_{n_x N_y -1, N_z -1; n_x N_y -1, N_z -2}), \\
\hat{h}_{17} &= \sum_{n_x} \sum_{n_y=2}^{N_y-2} (\hat{T}_{n_x n_y 0; n_x +1, n_y 0} + \hat{T}_{n_x n_y 0; n_x -1, n_y 0} + \hat{T}_{n_x n_y 0; n_x n_y 1} + \hat{T}_{n_x n_y 0; n_x n_y +1, 0} + \hat{T}_{n_x n_y 0; n_x n_y -1, 0}), \\
\hat{h}_{18} &= \sum_{n_x} \sum_{n_y=2}^{N_y-2} (\hat{T}_{n_x n_y N_z; n_x +1, n_y N_z} + \hat{T}_{n_x n_y N_z; n_x -1, n_y N_z} + \hat{T}_{n_x n_y N_z; n_x n_y N_z -1} + \\
&\quad + \hat{T}_{n_x n_y N_z; n_x n_y +1, N_z} + \hat{T}_{n_x n_y N_z; n_x n_y -1, N_z}), \\
\hat{h}_{19} &= \sum_{n_x} \sum_{n_z=2}^{N_z-2} (\hat{T}_{n_x 0 n_z; n_x +1, 0 n_z} + \hat{T}_{n_x 0 n_z; n_x -1, 0 n_z} + \hat{T}_{n_x 0 n_z; n_x 1 n_z} + \hat{T}_{n_x 0 n_z; n_x 0 n_z +1} + \hat{T}_{n_x 0 n_z; n_x 0 n_z -1}), \\
\hat{h}_{20} &= \sum_{n_x} \sum_{n_z=2}^{N_z-2} (\hat{T}_{n_x N_y n_z; n_x +1, N_y n_z} + \hat{T}_{n_x N_y n_z; n_x -1, N_y n_z} + \hat{T}_{n_x N_y n_z; n_x N_y -1, n_z} + \\
&\quad + \hat{T}_{n_x N_y n_z; n_x N_y n_z +1} + \hat{T}_{n_x N_y n_z; n_x N_y n_z -1}),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\hat{h}_{21} &= \sum_{n_x} \sum_{n_y=2}^{N_y-2} (\hat{T}_{n_x n_y 1; n_x+1, n_y 1} + \hat{T}_{n_x n_y 1; n_x-1, n_y 1} + \hat{T}_{n_x n_y 1; n_x n_y +1, 1} + \\
&\quad + \hat{T}_{n_x n_y 1; n_x n_y -1, 1} + \hat{T}_{n_x n_y 1; n_x n_y 2} + \hat{T}_{n_x n_y 1; n_x n_y 0}), \\
\hat{h}_{22} &= \sum_{n_x} \sum_{n_y=2}^{N_y-2} (\hat{T}_{n_x n_y N_z -1; n_x+1, n_y N_z -1} + \hat{T}_{n_x n_y N_z -1; n_x-1, n_y N_z -1} + \hat{T}_{n_x n_y N_z -1; n_x n_y +1, N_z -1} + \\
&\quad + \hat{T}_{n_x n_y N_z -1; n_x n_y -1, N_z -1} + \hat{T}_{n_x n_y N_z -1; n_x n_y N_z -2} + \hat{T}_{n_x n_y N_z -1; n_x n_y N_z }), \\
\hat{h}_{23} &= \sum_{n_x} \sum_{n_z=2}^{N_z-2} (\hat{T}_{n_x \ln_z; n_x+1, \ln_z} + \hat{T}_{n_x \ln_z; n_x-1, \ln_z} + \hat{T}_{n_x \ln_z; n_x \ln_z +1} + \hat{T}_{n_x \ln_z; n_x \ln_z -1} + \\
&\quad + \hat{T}_{n_x \ln_z; n_x 2 \ln_z} + \hat{T}_{n_x \ln_z; n_x 0 \ln_z}), \\
\hat{h}_{24} &= \sum_{n_x} \sum_{n_z=2}^{N_z-2} (\hat{T}_{n_x N_y -1, n_z; n_x+1, N_y -1, n_z} + \hat{T}_{n_x N_y -1, n_z; n_x-1, N_y -1, n_z} + \hat{T}_{n_x N_y -1, n_z; n_x N_y -1, n_z +1} + \\
&\quad + \hat{T}_{n_x N_y -1, n_z; n_x N_y -1, n_z -1} + \hat{T}_{n_x N_y -1, n_z; n_x N_y n_z} + \hat{T}_{n_x N_y -1, n_z; n_x N_y -2, n_z}), \\
\hat{h}_{25} &= \sum_{n_x} \sum_{n_y=2}^{N_y-2} \sum_{n_z=2}^{N_z-2} (\hat{T}_{n_x n_y n_z; n_x+1, n_y n_z} + \hat{T}_{n_x n_y n_z; n_x-1, n_y n_z} + \hat{T}_{n_x n_y n_z; n_x n_y +1, n_z} \\
&\quad + \hat{T}_{n_x n_y n_z; n_x n_y -1, n_z} + \hat{T}_{n_x n_y n_z; n_x n_y n_z} + \hat{T}_{n_x n_y n_z; n_x n_y n_z -1}). \tag{3.4}
\end{aligned}$$

Систем са хамилтонијаном (3.3) испитаћемо тако што ћемо наћи једночестичну таласну функцију система:

$$\begin{aligned}
|\Psi\rangle &= \sum_{n_x n_y n_z} A_{n_x n_y n_z} \alpha_{n_x n_y n_z}^+ |0\rangle \\
\sum_{n_x n_y n_z} |A_{n_x n_y n_z}|^2 &= 1. \tag{3.5}
\end{aligned}$$

Из једначине кретања за оператор $\alpha_{n_x n_y n_z}$ при чему је $\alpha_{n_x n_y n_z}(t) = \alpha_{n_x n_y n_z}(0)e^{-i\omega t}$, следи:

$$(E - [\alpha_{n_x n_y n_z}, H]) |\Psi\rangle = 0; E = \hbar\omega \tag{3.6}$$

при чему је H дато формулом (3.3).

Ако се (3.5) замени у (3.6) и због трансляционе инваријантности дуж X -правца узме да је:

$$A_{n_x n_y n_z} = \Phi_{n_y n_z} e^{ik_x n_x d} \tag{3.7}$$

из (3.6) се добија систем диференцних једначина за одређивање амплитуда $\Phi_{n_y n_z}$. У хамилтонијанима $\hat{h}_1, \dots, \hat{h}_{24}$ треба узети у обзир промене матричних елемената D и S на границама.

Као резултат указане процедуре добија се следећи систем граничних једначина:

$$\begin{aligned}
& (S + \eta_{00;10})\Phi_{10} + (S + \eta_{00;01})\Phi_{01} - \\
& - [E - 4D - 2\delta_{00;00} - \delta_{00;10} - \delta_{00;01} - 2(S + \eta_{00;00})\cos dk_x] \Phi_{00} = 0, \\
& (S + \eta_{N_y N_z; N_y -1, N_z})\Phi_{N_y -1, N_z} + (S + \eta_{N_y N_z; N_y N_z -1})\Phi_{N_y N_z -1} - \\
& - [E - 4D - 2\delta_{N_y N_z; N_y N_z} - \delta_{N_y N_z; N_y -1, N_z} - \delta_{N_y N_z; N_y N_z -1} - 2(S + \eta_{N_y N_z; N_y N_z})\cos dk_x] \Phi_{N_y N_z} = 0, \\
& (S + \eta_{N_y 0; N_y -1, 0})\Phi_{N_y -1, 0} + (S + \eta_{N_y 0; N_y 1})\Phi_{N_y 1} - \\
& - [E - 4D - 2\delta_{N_y 0; N_y 0} - \delta_{N_y 0; N_y -1, 0} - \delta_{N_y 0; N_y 1} - 2(S + \eta_{N_y 0; N_y 0})\cos dk_x] \Phi_{N_y 0} = 0, \\
& (S + \eta_{0 N_z; 1 N_z})\Phi_{1 N_z} + (S + \eta_{0 N_z; 0 N_z -1})\Phi_{0 N_z -1} - \\
& - [E - 4D - 2\delta_{0 N_z; 0 N_z} - \delta_{0 N_z; 1 N_z} - \delta_{0 N_z; 0 N_z -1} - 2(S + \eta_{0 N_z; 0 N_z})\cos dk_x] \Phi_{0 N_z} = 0, \\
& (S + \eta_{10;20})\Phi_{20} + (S + \eta_{10;11})\Phi_{11} + (S + \eta_{10;00})\Phi_{00} - \\
& - [E - 5D - 2\delta_{10;10} - \delta_{10;20} - \delta_{10;11} - \delta_{10;00} - 2(S + \eta_{10;10})\cos dk_x] \Phi_{10} = 0, \\
& (S + \eta_{N_y -1, 0; N_y -1, 1})\Phi_{N_y -1, 1} + (S + \eta_{N_y -1, 0; N_y 0})\Phi_{N_y 0} + (S + \eta_{N_y -1, 0; N_y -2, 0})\Phi_{N_y -2, 0} - \\
& - [E - 5D - 2\delta_{N_y -1, 0; N_y -1, 0} - \delta_{N_y -1, 0; N_y -1, 1} - \delta_{N_y -1, 0; N_y 0} - \delta_{N_y -1, 0; N_y -2, 0} - \\
& - 2(S + \eta_{N_y -1, 0; N_y -1, 0})\cos dk_x] \Phi_{N_y -1, 0} = 0, \\
& (S + \eta_{01;00})\Phi_{00} + (S + \eta_{01;11})\Phi_{11} + (S + \eta_{01;02})\Phi_{02} - \\
& - [E - 5D - 2\delta_{01;01} - \delta_{01;00} - \delta_{01;11} - \delta_{01;02} - 2(S + \eta_{01;01})\cos dk_x] \Phi_{01} = 0, \\
& (S + \eta_{0, N_z -1; 0 N_z})\Phi_{0 N_z} + (S + \eta_{0 N_z -1; 1 N_z -1})\Phi_{1 N_z -1} + (S + \eta_{0, N_z -1; 0 N_z -2})\Phi_{0 N_z -2} - \\
& - [E - 5D - 2\delta_{0 N_z -1; 0 N_z -1} - \delta_{0 N_z -1; 0 N_z} - \delta_{0 N_z -1; 1 N_z -1} - \delta_{0 N_z -1; 0 N_z -2} - \\
& - 2(S + \eta_{0 N_z -1; 0 N_z -1})\cos dk_x] \Phi_{0 N_z -1} = 0, \\
& (S + \eta_{1 N_z; 0 N_z})\Phi_{0 N_z} + (S + \eta_{1 N_z; 1 N_z -1})\Phi_{1 N_z -1} + (S + \eta_{1 N_z; 2 N_z})\Phi_{2 N_z} - \\
& - [E - 5D - 2\delta_{1 N_z; 1 N_z} - \delta_{1 N_z; 0 N_z} - \delta_{1 N_z; 1 N_z -1} - \delta_{1 N_z; 2 N_z} - 2(S + \eta_{1 N_z; 1 N_z})\cos dk_x] \Phi_{1 N_z} = 0,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \left(S + \eta_{N_y-1, N_z; N_y-1, N_z-1} \right) \Phi_{N_y-1, N_z-1} + \left(S + \eta_{N_y-1, N_z; N_y N_z} \right) \Phi_{N_y N_z} + \\
& + \left(S + \eta_{N_y-1, N_z; N_y-2, N_z} \right) \Phi_{N_y-2, N_z} - [E - 5D - 2\delta_{N_y-1, N_z; N_y-1, N_z} - \delta_{N_y-1, N_z; N_y-1, N_z-1} - \\
& - \delta_{N_y-1, N_z; N_y N_z} - \delta_{N_y-1, N_z; N_y-2, N_z} - 2(S + \eta_{N_y-1, N_z; N_y-1, N_z}) \cos dk_x] \Phi_{N_y-1, N_z} = 0, \\
& \left(S + \eta_{N_y 1; N_y 0} \right) \Phi_{N_y 0} + \left(S + \eta_{N_y 1; N_y-1, 1} \right) \Phi_{N_y-1, 1} + \left(S + \eta_{N_y 1; N_y 2} \right) \Phi_{N_y 2} - \\
& - [E - 5D - 2\delta_{N_y 1; N_y 2} - \delta_{N_y 1; N_y 1} - \delta_{N_y 1; N_y-1, 1} - \delta_{N_y 1; N_y 2} - 2(S + \eta_{N_y 1; N_y 1}) \cos dk_x] \Phi_{N_y 1} = 0, \\
& \left(S + \eta_{N_y N_z-1; N_y-1, N_z-1} \right) \Phi_{N_y-1, N_z-1} + \left(S + \eta_{N_y N_z-1; N_y N_z} \right) \Phi_{N_y N_z} + \left(S + \eta_{N_y N_z-1; N_y N_z-2} \right) \Phi_{N_y N_z-2} - \\
& - [E - 5D - 2\delta_{N_y N_z-1; N_y N_z-1} - \delta_{N_y N_z-1; N_y-1, N_z-1} - \delta_{N_y N_z-1; N_y N_z} - \\
& - \delta_{N_y N_z-1; N_y N_z-2} - 2(S + \eta_{N_y N_z-1; N_y N_z-1}) \cos dk_x] \Phi_{N_y N_z-1} = 0, \\
& S\Phi_{21} + (S + \eta_{11; 01}) \Phi_{01} + S\Phi_{12} + (S + \eta_{11; 10}) \Phi_{10} - \\
& - (E - 6D - \delta_{11; 01} - \delta_{11; 10} - 2S \cos dk_x) \Phi_{11} = 0, \\
& \left(S - \eta_{N_y-1, 1; N_y 1} \right) \Phi_{N_y 1} + S\Phi_{N_y-2, 1} + S\Phi_{N_y-1, 2} + \left(S + \eta_{N_y-1, 1; N_y-1, 0} \right) \Phi_{N_y-1, 0} - \\
& - (E - 6D - \delta_{N_y-1; N_y 1} - \delta_{N_y-1; N_y-1, 0} - 2S \cos dk_x) \Phi_{N_y-1, 1} = 0, \\
& S\Phi_{2N_z-1} + (S + \eta_{1N_z-1; 0N_z-1}) \Phi_{0N_z-1} + (S + \eta_{1N_z-1; 1N_z}) \Phi_{1N_z} + S\Phi_{1N_z-2} - \\
& - (E - 6D - \delta_{1N_z-1; 0N_z-1} - \delta_{1N_z-1; 1N_z} - 2S \cos dk_x) \Phi_{1N_z-1} = 0, \\
& \left(S + \eta_{N_y-1, N_z-1; N_y N_z-1} \right) \Phi_{N_y N_z-1} + S\Phi_{N_y-2; N_z-1} + \left(S + \eta_{N_y-1, N_z-1; N_y-1, N_z} \right) \Phi_{N_y-1, N_z} + \\
& + S\Phi_{N_y-1, N_z-2} - (E - 6D - \delta_{N_y-1, N_z-1; N_y N_z-1} - \delta_{N_y-1, N_z-1; N_y-1, N_z} - 2S \cos dk_x) \Phi_{N_y-1, N_z-1} = 0, \\
& \left(S + \eta_{n_y 0; n_y 1} \right) \Phi_{n_y 1} + \left(S + \eta_{n_y 0; n_y+1, 0} \right) \Phi_{n_y+1, 0} + \left(S + \eta_{n_y 0; n_y-1, 0} \right) \Phi_{n_y-1, 0} - \\
& - [E - 5D - 2\delta_{n_y 0; n_y 0} - \delta_{n_y 0; n_y 1} - \delta_{n_y 0; n_y+1, 0} - \delta_{n_y 0; n_y-1, 0} - 2(S + \eta_{n_y 0; n_y 0}) \cos dk_x] \Phi_{n_y 0} = 0, \\
& n_y \in [2, N_y - 2] \\
& \left(S + \eta_{n_y N_z; n_y N_z-1} \right) \Phi_{n_y N_z-1} + \left(S + \eta_{n_y N_z; n_y+1, N_z} \right) \Phi_{n_y+1, N_z} + \left(S + \eta_{n_y N_z; n_y-1, N_z} \right) \Phi_{n_y-1, N_z} - \\
& - [E - 5D - 2\delta_{n_y N_z; n_y N_z} - \delta_{n_y N_z; n_y N_z-1} - \delta_{n_y N_z; n_y+1, N_z} - \\
& - \delta_{n_y N_z; n_y-1, N_z} - 2(S + \eta_{n_y N_z; n_y N_z}) \cos dk_x] \Phi_{n_y N_z} = 0, \\
& n_y \in [2, N_y - 2] \\
& \left(S + \eta_{0n_z; 1n_z} \right) \Phi_{1n_z} + \left(S + \eta_{0n_z; 0n_z+1} \right) \Phi_{0n_z+1} + \left(S + \eta_{0n_z; 0n_z-1} \right) \Phi_{0n_z-1} - \\
& - [E - 5D - 2\delta_{0n_z; 0n_z} - \delta_{0n_z; 1n_z} - \delta_{0n_z; 0n_z+1} - \delta_{0n_z; 0n_z-1} - 2(S + \eta_{0n_z; 0n_z}) \cos dk_x] \Phi_{0n_z} = 0, \\
& n_z \in [2, N_z - 2]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \left(S + \eta_{N_y n_z; N_y -1, n_z} \right) \Phi_{N_y -1, n_z} + \left(S + \eta_{N_y n_z; N_y n_z +1} \right) \Phi_{N_y n_z +1} + \left(S + \eta_{N_y n_z; N_y n_z -1} \right) \Phi_{N_y n_z -1} - \\
& - [E - 5D - 2\delta_{N_y n_z; N_y N_z} - \delta_{N_y n_z; N_y -1, n_z} - \delta_{N_y n_z; N_y n_z +1} - \delta_{N_y n_z; N_y n_z -1} - \\
& - 2(S + \eta_{N_y n_z; N_y n_z}) \cos dk_x] \Phi_{N_y n_z} = 0 \\
& n_z \in [2, N_z - 2]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
S\Phi_{n_y +1, 1} + S\Phi_{n_y -1, 1} + S\Phi_{n_y, 2} + \left(S + \eta_{n_y 1; n_y 0} \right) \Phi_{n_y 0} - [E - 6D - \delta_{n_y 1; n_y 0} - 2S \cos dk_x] \Phi_{n_y 1} = 0 \\
n_y \in [2, N_y - 2]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
S\Phi_{n_y +1, N_z -1} + S\Phi_{n_y -1, N_z -1} + S\Phi_{n_y N_z, -2} + (S + \eta_{n_y N_z -1; n_y N_z}) \Phi_{n_y N_z} - \\
- [E - 6D - \delta_{n_y N_z -1; n_y N_z} - 2S \cos dk_x] \Phi_{n_y N_z -1} = 0 \\
n_y \in [2, N_y - 2]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
S\Phi_{1 n_z +1} + S\Phi_{1 n_z -1} + S\Phi_{2 n_z} + (S + \eta_{1 n_z; 0 n_z}) \Phi_{0 n_z} - [E - 6D - \delta_{1 n_z; 0 n_z} - 2S \cos dk_x] \Phi_{1 n_z} = 0 \\
n_z \in [2, N_z - 2]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
S\Phi_{N_y -1, n_z -1} + S\Phi_{N_y -1, n_z -1} + (S + \eta_{N_y -1, n_z; N_y n_z}) \Phi_{N_y n_z} + S\Phi_{N_y -2, n_z} - \\
- [E - 6D - \delta_{N_y -1, n_z; N_y n_z} - 2S \cos dk_x] \Phi_{N_y -1, n_z} = 0 \\
n_z \in [2, N_z - 2]
\end{aligned} \tag{3.8}$$

и једначина унутрашњег дела квантне жице:

$$\begin{aligned}
\Phi_{n_y +1, n_z} + \Phi_{n_y -1, n_z} + \Phi_{n_y n_z +1} + \Phi_{n_y n_z -1} - \rho \Phi_{n_y n_z} = 0 \\
n_y \in 2, 3, \dots, N_y - 2; \quad n_z \in 2, 3, \dots, N_z - 2
\end{aligned} \tag{3.9}$$

где је:

$$\rho = \frac{E - 6D - 2S \cos dk_x}{S}. \tag{3.10}$$

Ознаке употребљене у формулама од (3.7) до (3.10) су следеће:

са d је означена константа решетке, D и S представљају матричне елементе преноса за најближе суседе, са δ су означене граничне поправке матричних елемената D , док су са η означене граничне поправке матричних елемената S .

Систем једначина (3.8) и (3.9) решаваћемо аналогно поступку којим је решаван проблем полубесконачних структура [80], [81], [82]. То значи да ћемо решење (3.9) тражити у облику линеарне комбинације синусних функција са помереном фазом тј.

$$\Phi_{n_y n_z} = \sum_{\mu=0}^{\mu_0} F_\mu \sin k_y d(n_y - \mu) \sin k_z d(n_z - \mu) \quad (3.11)$$

а затим то решење заменити у (3.8) и одредити коефицијенте F_μ такође да све једначине из скупа (3.8) буду задовољене.

Функција (3.11) задовољава (3.9) ако је $\rho = 2(\cos k_y d + \cos k_z d)$, што даје енергије елементарних побуђења у облику:

$$E = 6D + 2S(\cos k_x d + \cos k_y d + \cos k_z d) \quad (3.12)$$

Треба напоменути да је при $N_y > 3$ и $N_z > 3$ број граничних једначина (3.8) једнак $4(N_y + N_z) - 8$. Такође је важно напоменути да се граничне једначине могу задовољити на описани начин само периодичном функцијом (3.11), што значи да можемо решити проблем тзв. запреминских стања. Што се тиче локализованих стања где је Φ типа $e^{-d\chi_1 n_y - d\chi_2 n_z}$, линеарна комбинација типа (3.11) не може се образовати јер јој чланове не би чиниле линеарно независне функције. Због тога не постоји могућност да све граничне једначине (3.8) буду задовољене. Проблем егзистенције локализованих стања у квантној жици захтева посебно испитивање.

3.3. Хамилтонијани различитих физичких система

Општи хамилтонијан (3.1) који је анализиран у претходном параграфу дат је у хармонијској апроксимацији. Овде ћемо испитивати више различитих физичких система, а хармонијски хамилтонијан узећемо само за систем електрона. Код овог хамилтонијана, који је дат упрошћеним Хабардовим моделом [51], оператор \hat{T} из (3.1) има облик:

$$\begin{aligned}\hat{T}_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z} = & W_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z} \alpha_{n_x n_y n_z}^+ \alpha_{n_x n_y n_z} - \\ & - W_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z} \alpha_{n_x n_y n_z}^+ \alpha_{m_x m_y m_z}.\end{aligned}\quad (3.13)$$

Оператори α^+ и α су Ферми оператори који креирају и анихилирају електроне у датој тачки простора. Кофицијенти W су матрични елементи јон-јон интеракције и реда су величине око 1 eV.

Осим електронског система посматраћемо систем спинских талоса у Хајзенберговом феромагнетику са спином $S = \frac{1}{2}$, затим систем Френкелових екситона и систем фероелектричних побуђења. Хамилтонијане ових система нећемо узимати у хармонијској апроксимацији него ћемо прећи на еквивалентне хамилтонијане у које су укључене концентрације елементарних побуђења. Овакви еквивалентни хамилтонијани коришћени су у радовима [83], [84]. Еквивалентни хамилтонијан репрезентован је помоћу Бозе оператора. Бозе елементарна побуђења имају исти закон дисперзије као реална паулионска побуђења ако се третирају у тјабликовској апроксимацији [8], која у суштини представља једну од варијанти self consistent field.

За систем спинских таласа, чији је оригинални хамилтонијан дат са:

$$H_{FM} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{n} \vec{m}} I_{\vec{n} \vec{m}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}} - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n} \vec{m}} I_{\vec{n} \vec{m}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}} - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n} \vec{m}} I_{\vec{n} \vec{m}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}} P_{\vec{m}}^+ P_{\vec{m}} \quad (3.14)$$

где су I интеграли измене, а P^+ и P Паули оператори, еквивалентни хамилтонијан има облик:

$$H_{FM}^{eq} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{n} \vec{m}} (1 - 2C_{\vec{m}}) I_{\vec{n} \vec{m}} \beta_{\vec{n}}^+ \beta_{\vec{n}} - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n} \vec{m}} (1 - 2C_{\vec{n}}) I_{\vec{n} \vec{m}} \beta_{\vec{n}}^+ \beta_{\vec{m}} \quad (3.15)$$

где су β^+ и β Бозе оператори, док су концентрације елементарних побуђења дате са:

$$C_{n_x n_y n_z} = \left\langle P_{n_x n_y n_z}^+ P_{n_x n_y n_z} \right\rangle. \quad (3.16)$$

На основу овога, за систем спинских таласа оператор \hat{T} у (3.1) има облик:

$$\begin{aligned}\hat{T}_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z} &= \frac{1}{2}(1 - 2C_{m_x m_y m_z})I_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z} \times \beta_{n_x n_y n_z}^+ \beta_{n_x n_y n_z} - \\ &- \frac{1}{2}(1 - 2C_{n_x n_y n_z})I_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z} \times \beta_{n_x n_y n_z}^+ \beta_{m_x m_y m_z}.\end{aligned}\quad (3.17)$$

Оригинални хамилтонијан система Френкелових екситона, који одговарају двонивовској шеми молекулских побуђења [27], има облик:

$$H_{eks} = (\varepsilon_f - \varepsilon_0) \sum_{\bar{n}} P_{\bar{n}}^+ P_{\bar{n}} + \sum_{\bar{n}\bar{m}} X_{\bar{n}\bar{m}} P_{\bar{n}}^+ P_{\bar{m}} + \sum_{\bar{n}\bar{m}} Y_{\bar{n}\bar{m}} P_{\bar{n}}^+ P_{\bar{m}} + \sum_{\bar{n}\bar{m}} Z_{\bar{n}\bar{m}} P_{\bar{n}}^+ P_{\bar{m}} P_{\bar{m}}^+ P_{\bar{n}}, \quad (3.18)$$

где је $\varepsilon_f - \varepsilon_0$ енергија побуђења изолованог молекула, док су X , Y и Z матрични елементи дипол- диполне интеракције. Еквивалентни хамилтонијан дат је са:

$$\begin{aligned}H_{eks}^{eq} &= (\varepsilon_f - \varepsilon_0) \sum_{\bar{n}} \beta_{\bar{n}}^+ \beta_{\bar{n}} + \sum_{\bar{n}\bar{m}} (X_{\bar{n}\bar{m}} + 2Z_{\bar{n}\bar{m}} \tilde{C}_{\bar{m}}) \beta_{\bar{n}}^+ \beta_{\bar{n}} + \\ &+ \sum_{\bar{n}\bar{m}} (1 - 2\tilde{C}_{\bar{n}}) Y_{\bar{n}\bar{m}} \beta_{\bar{n}}^+ \beta_{\bar{m}},\end{aligned}\quad (3.19)$$

где су β^+ и β Бозе оператори креације и анихилације екситона, док су екситонске концетрације дате са:

$$\tilde{C}_{n_x n_y n_z} = \left\langle P_{n_x n_y n_z}^+ P_{n_x n_y n_z} \right\rangle. \quad (3.20)$$

На основу овога, за случај екситонског система \hat{T} у (3.1) има облик:

$$\begin{aligned}\hat{T}_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z} &= [\varepsilon_f - \varepsilon_0 + X_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z} + 2Z_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z} \tilde{C}_{m_x m_y m_z}] \beta_{n_x n_y n_z}^+ \beta_{n_x n_y n_z} + \\ &+ (1 - 2\tilde{C}_{n_x n_y n_z}) Y_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z} \beta_{n_x n_y n_z}^+ \beta_{m_x m_y m_z}.\end{aligned}\quad (3.21)$$

Фероелектрична побуђења у фероелектрицима тип КДП [85] такође имају паулионску кинематику. Хамилтонијан модела фероелектрика који је коришћен у [38] има облик:

$$H_{FE} = \frac{1}{2} \sum_{\bar{n}\bar{m}} J_{\bar{n}\bar{m}} P_{\bar{n}}^+ P_{\bar{n}} - \frac{1}{2} \sum_{\bar{n}\bar{m}} (\lambda_{\bar{n}\bar{m}} P_{\bar{n}}^+ P_{\bar{m}} - \frac{1}{2} \sum_{\bar{n}\bar{m}} J_{\bar{n}\bar{m}} P_{\bar{n}}^+ P_{\bar{m}} P_{\bar{m}}^+ P_{\bar{n}}), \quad (3.22)$$

где су J интеграли измене у квазиспинском моделу. Величина λ , која карактерише пренос побуђења са чвора на чвор, знатно је мања од интеграла измене и добијена је у раду [38] унитарном трансформацијом фероелектричног хамилтонијана који је садржао процесе трећег реда.

На исти начин као и раније из (3.22) се добија еквивалентни хамилтонијан облика:

$$H_{FE}^{eq} = \frac{1}{2} \sum_{\bar{n}\bar{m}} (1 - 2\tilde{\tilde{C}}_{\bar{m}}) J_{\bar{n}\bar{m}} \beta_{\bar{n}}^+ \beta_{\bar{n}} - \frac{1}{2} \sum_{\bar{n}\bar{m}} (1 - 2\tilde{\tilde{C}}_{\bar{n}} \lambda_{\bar{n}\bar{m}}) \beta_{\bar{n}}^+ \beta_{\bar{m}}. \quad (3.23)$$

Овде су β^+ и β који креирају и анихилирају фероелектрична побуђења, док су концентрације ових побуђења дате са:

$$\tilde{\tilde{C}}_{n_x n_y n_z} = \left\langle P_{n_x n_y n_z}^+ P_{n_x n_y n_z} \right\rangle. \quad (3.24)$$

Оператор \hat{T} у 3.1) за фероелектрик типа КДП може да се напише у облику:

$$\begin{aligned} \hat{T}_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z} &= \frac{1}{2} (1 - 2 \tilde{\tilde{C}}_{m_x m_y m_z}) J_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z} \beta_{n_x n_y n_z}^+ \beta_{n_x n_y n_z} - \\ &- \frac{1}{2} (1 - 2 \tilde{\tilde{C}}_{n_x n_y n_z}) \lambda_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z} \beta_{n_x n_y n_z}^+ \beta_{m_x m_y m_z}. \end{aligned} \quad (3.25)$$

Формуле (3.13), (3.17), (3.21) и (3.25) омогућују да се основне функције добијене у претходном параграфу непосредно примене на сваки од указаних система.

Треба напоменути да је укључивање концентрације у анализу, које је извршено преласком на еквивалентне хамилтонијане, веома значајно за реалистичнију анализу јер је очигледно да се концентрације у граничним слојевима морају мењати због промена међуатомских интеракција.

Увођење концентрација у рачун посебно је битно за систем фероелектричних побуђења и спинских таласа, будући да у тим системима оне могу бити и реда јединице. Код екситона максималне концентрације су реда 10^{-3} те су стога утицаји њихових промена мање значајни.

На крају треба рећи да у (3.13) имамо Ферми операторе док у (3.17), (3.21) и (3.25) фигуришу Бозе оператори. Пошто се анализа своди на испитивање једночестичне таласне функције, разлика у кинематици оператора нема никаквог утицаја на коначне резултате.

3.4. Екстремно танке квантне жице

Овде ће као илустративни примери бити анализиране екстремно танке квантне жице и то једна са четири нити ($N_y = N_z = 1$) и структура са три нити ($N_y = 1; N_z = 0$). Како је напоменуто у параграфу 3.1 структура са три нити подсећа на Скотов модел [78], [79] за α -хеликс. Разлика се састоји у томе што су у Скотовом моделу пептидне групе лоциране у теменима равнотраног троугла, док су код жице са три нити атоми распоређени у теменима једнакокраког правоуглог троугла.

Прво ћемо анализирати систем са четири нити. У овом случају првих шеснаест једначина у (3.8) дају четири идентичне четворке једначина док се преостале једначине у (3.8) своде на идентитетте $0=0$. Једна од поменутих идентичних четворки има облик:

$$\begin{aligned}
 & [E - 4D - 2\delta_{00,00} - \delta_{00,01} - \delta_{00,10} - 2(S + \eta_{00,00}) \cos dk_x] \Phi_{00} - \\
 & - (S + \eta_{00,01}) \Phi_{01} - (S + \eta_{00,10}) \Phi_{10} = 0 \\
 & - (S + \eta_{01,00}) \Phi_{00} + [E - 4D - 2\delta_{01,01} - \delta_{01,00} - \delta_{01,11} - 2(S + \eta_{01,01}) \cos dk_x] \Phi_{01} - \\
 & - (S + \eta_{01,11}) \Phi_{11} = 0 \\
 & - (S + \eta_{10,00}) \Phi_{00} + [E - 4D - 2\delta_{10,10} - \delta_{10,00} - \delta_{10,11} - 2(S + \eta_{10,10}) \cos dk_x] \Phi_{10} - \\
 & - (S + \eta_{10,11}) \Phi_{11} = 0 \\
 & - (S + \eta_{11,01}) \Phi_{01} - (S + \eta_{11,10}) \Phi_{10} + [E - 4D - 2\delta_{11,11} - \delta_{11,01} - \delta_{11,10} - \\
 & - 2(S + \eta_{11,11}) \cos dk_x] \Phi_{11} = 0 \tag{3.26}
 \end{aligned}$$

Пошто је пример илустративан решићемо га у нултој апроксимацији, тј. занемарићемо поравке δ и η .

Тада добијамо систем једначина:

$$\begin{aligned}
 R \Phi_{00} - \Phi_{01} - \Phi_{10} &= 0 \\
 - \Phi_{00} + R \Phi_{01} - \Phi_{11} &= 0 ; \quad R = \frac{E - 4D - 2S \cos dk_x}{S} \\
 - \Phi_{00} + R \Phi_{10} - \Phi_{11} &= 0 \\
 - \Phi_{01} - \Phi_{10} + R \Phi_{11} &= 0 \tag{3.27}
 \end{aligned}$$

Детерминанта система има решења $R_1 = 2; R_2 = -2; R_3 = R_4 = 0$, што даје енергије:

$$E_1 = 4D + 4S \cos^2 \frac{dk_x}{2}; \quad E_2 = 4D - 4S \sin^2 \frac{dk_x}{2}; \quad E_3 = E_4 = 4D + 2S \cos dk_x. \quad (3.28)$$

За коефицијенте Φ добијамо изразе:

$$\begin{aligned} \Phi_{11}(R) &= \frac{R^2 - 2}{\sqrt{N_x(R^4 - 2R^2 + 8)}}; \quad \Phi_{00}(R) = \frac{2}{\sqrt{N_x(R^4 - 2R^2 + 8)}}, \\ \Phi_{01}(R) &= \Phi_{10}(R) = \frac{R}{\sqrt{N_x(R^4 - 2R^2 + 8)}} \end{aligned} \quad (3.29)$$

одакле следи:

$$\Phi_{11}(E_1) = \frac{1}{2\sqrt{N_x}}; \quad \Phi_{00}(E_1) = \frac{1}{2\sqrt{N_x}}; \quad \Phi_{01}(E_1) = \frac{1}{2\sqrt{N_x}}; \quad \Phi_{10}(E_1) = \frac{1}{2\sqrt{N_x}}, \quad (3.30)$$

$$\Phi_{11}(E_2) = \frac{1}{2\sqrt{N_x}}; \quad \Phi_{00}(E_2) = \frac{1}{2\sqrt{N_x}}; \quad \Phi_{01}(E_2) = -\frac{1}{2\sqrt{N_x}}; \quad \Phi_{10}(E_2) = -\frac{1}{2\sqrt{N_x}}; \quad (3.31)$$

$$\Phi_{11}(E_3 = E_4) = -\frac{1}{2\sqrt{N_x}}; \quad \Phi_{00}(E_3 = E_4) = \frac{1}{2\sqrt{N_x}}; \quad \Phi_{01}(E_3 = E_4) = \Phi_{10}(E_3 = E_4) = 0. \quad (3.32)$$

Најинтересантнији је свакако случај (3.7). Види се да је побуђењима са енергијом $E_3 = E_4 = 4D + 2S \cos dk_x$, забрањен пролаз " кроз нити 01 и 10, тако да се за њих систем од четири нити понаша као систем од две нити.

На крају ћемо израчунати енергије E_1, \dots, E_4 за систем електрона ($D = W; S = -W$). Тада су вредности енергија:

$$\begin{aligned} E_1 &= 4W \sin^2 \frac{dk_x}{2}; \quad E_2 = 4W \cos^2 \frac{dk_x}{2} \\ E_3 = E_4 &= 4W \left(1 - \frac{1}{2} \cos dk_x\right). \end{aligned} \quad (3.33)$$

Одавде се види да на граници Ферми површине $dk_x \sim \pi$, највишу енергију имају електрони који могу да пролазе само кроз две нити четвротонитног система. Одавде би се могло закључити да за високоенергетске електроне у квантним јицама постоје неке непремостиве конфигурационе баријере.

За систем са три нити све једначине у (3.8) своде се на прву, трећу и четврту једначину из (3.8) или на идентитете 0=0. Тројка независних једначина у нултој апроксимацији, коју ћемо и овде користити, своди се на:

$$\begin{aligned} r\Phi_{00} - \Phi_{01} - \Phi_{10} &= 0 \\ -\Phi_{00} + r\Phi_{01} &= 0 \quad ; \quad r = \frac{E - 4D - 2S \cos dk_x}{S} \\ -\Phi_{00} + r\Phi_{10} &= 0 \end{aligned} \quad (3.34)$$

Вредности параметра r су $r_1 = \sqrt{2}$; $r_2 = -\sqrt{2}$ и $r_3 = 0$, што даје енергије:

$$E_1 = 4D + S(2 \cos dk_x + \sqrt{2}); E_2 = 4D + S(2 \cos dk_x - \sqrt{2}); E_3 = 4D + 2S \cos dk_x \quad (3.35)$$

и коефицијенте:

$$\begin{aligned} \Phi_{10}(E_1) &= \frac{1}{2\sqrt{N_x}} ; \quad \Phi_{00}(E_1) = \frac{1}{\sqrt{2N_x}} ; \quad \Phi_{01}(E_1) = \frac{1}{2\sqrt{N_x}} \\ \Phi_{10}(E_2) &= \frac{1}{2\sqrt{N_x}} ; \quad \Phi_{00}(E_2) = -\frac{1}{\sqrt{2N_x}} ; \quad \Phi_{01}(E_2) = \frac{1}{2\sqrt{N_x}} \\ \Phi_{10}(E_3) &= -\frac{1}{\sqrt{2N_x}} ; \quad \Phi_{00}(E_3) = 0 ; \quad \Phi_{01}(E_3) = \frac{1}{\sqrt{2N_x}} . \end{aligned} \quad (3.36)$$

Из (3.36) се види да, као и у случају система са четири нити, постоје конфигурационе забране за побуђења одређених енергија. Побуђења са енергијом E_3 не могу да се крећу дуж нити „00“, тако да се за њих систем са три нити понаша као систем са две нити.

Интересантно је поредити електроне у систему са четири и три нити. У систему са четири нити једна електронска грана (E_1) нема геп. У систему са три нити сва три типа електронских побуђења имају геп у хармонијској апроксимацији.

Овај закључак је свакако веома интересантан јер излази да у систему са три нити не постоји ни једна нормална електронска грана са $E(0)=0$.

Закључци до којих смо у овом параграфу дошли важе за случај нулте апроксимације, кад се граничне промене међуатомских интеракција занемарују и вероватно је да постоје системи за које је ова апроксимација добра. Ако се узму у обзир поправке δ и η слике и закључци добијени за нулту апроксимацију могу да се мењају у смислу да структурне забране простирања елементарних ексцитација одређених енергија постају лабавије. Међутим и тада се у структурама могу издвојити неки делови у којима је концентрација елементарних побуђења веома мала.

Изложени микротеоријски прилаз проблему квантних жица указује да анализе оваквих система захтевају веома сложену, најчешће нумеричку анализу. Веома велики број граничних једначина које треба задовољити представља основни математички проблем, и не само математички проблем. У овим граничним једначинама фигуришу поправке међуатомских интеракција у граничним слојевима које би, стриктно говорећи, требало експериментално одредити за сваки систем.

У овој глави, поред опште теорије, дати су и неки илустративни примери који се односе на електроне у жицама са четири и три нити. Резултати до којих се дошло указују да веома танке квантне жице могу да поседују веома специфичне електронске спектре и још специфичније просторне дистрибууције електрона. На основу ових простих примера може се закључити да изучавање квантних жица може да нас доведе до низа интересантних и корисних ефеката.

4. КОНТИНУАЛНА АПРОКСИМАЦИЈА У ТЕОРИЈИ КВАНТНИХ ЖИЦА

4.1. Таласна функција квантне жице у континуалној априксимацији

Пре преласка на континуум навешћемо неке основне ставове из претходне главе.

Хамилтонијан квантне жице може се записати као:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{\substack{n_x n_y n_z \\ m_x m_y m_z}} \hat{T}_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z} \\ \hat{T}_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z} = & D_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z} \alpha^+_{n_x n_y n_z} \alpha_{m_x m_y m_z} + S_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z} \alpha^+_{n_x n_y n_z} \alpha_{m_x m_y m_z} \\ n_x \in & (-\frac{N_x}{2}, \frac{N_x}{2}) ; \quad N_x \sim 10^8 \\ n_y \in & (0, N_y) ; \quad N_y \sim 5 - 10 \\ n_z \in & (0, N_z) ; \quad N_z \sim 5 - 10 \end{aligned} \quad (4.1)$$

Треба напоменути да S и D карактеришу међуатомске интеракције у општем случају. Касније ће оне бити специјализоване за различите типове елементарних побуђења.

Записано у априксимацији најближих суседа хамилтонијан (4.1) има облик:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{n_x n_y n_z} (\hat{T}_{n_x n_y n_z; n_x + 1, n_y n_z} + \hat{T}_{n_x n_y n_z; n_x + 1, n_y n_z} + \hat{T}_{n_x n_y n_z; n_x n_y + 1, n_z} + \\ & + \hat{T}_{n_x n_y n_z; n_x n_y - 1, n_z} + \hat{T}_{n_x n_y n_z; n_x n_y n_z + 1} + \hat{T}_{n_x n_y n_z; n_x n_y n_z - 1}) \end{aligned} \quad (4.2)$$

У хамилтонијанима (4.2) треба посебно издвојити чланове који одговарају граничним слојевима и ивицама дуж Y и Z правца. У овим деловима хамилтонијана интеракције S и D се мењају у односу на вредности које имају у дубинским слојевима.

Хамилтонијан (4.2) може се записати у форми:

$$\hat{H} = \sum_{\mu=1}^{25} \hat{h}_\mu . \quad (4.3)$$

У овој формулама делови хамилтонијана $\hat{h}_1 \dots \hat{h}_{24}$ садрже граничне услове и деформације, а само \hat{h}_{25} :

$$\begin{aligned} \hat{h}_{25} = & \sum_{n_x} \sum_{n_y=2}^{N_y} \sum_{n_z=2}^{N_z-2} (\hat{T}_{n_x n_y n_z; n_x+1, n_y n_z} + \hat{T}_{n_x n_y n_z; n_x-1, n_y n_z} + \hat{T}_{n_x n_y n_z; n_x n_y+1, n_z} + \\ & + \hat{T}_{n_x n_y n_z; n_x n_y-1, n_z} + \hat{T}_{n_x n_y n_z; n_x n_y n_z} + \hat{T}_{n_x n_y n_z; n_x n_y n_z-1}) . \end{aligned} \quad (4.4)$$

одговара пуној симетрији у унутрашњости структуре.

Особине квантне жице испитиваћемо преко једночестичне таласне функције:

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle = & \sum_{n_x n_y n_z} A_{n_x n_y n_z} \alpha_{n_x n_y n_z}^+ |0\rangle \\ & \sum_{n_x n_y n_z} |A_{n_x n_y n_z}|^2 = 1 \end{aligned} \quad (4.5)$$

Из једначине кретања за оператор α следи:

$$(E - [\alpha_{n_x n_y n_z}, H]) |\Psi\rangle = 0 ; \quad E = \hbar\omega \quad (4.6)$$

при чему је H дато формулом (4.3).

Пошто је структура трансационо инваријантна дуж X правца, за коефицијенте A ћемо претпоставити да су облика:

$$A_{n_x n_y n_z} = \Phi_{n_y n_z} e^{ik_x n_x d} . \quad (4.7)$$

Из (4.6) за коефицијенте Φ добијамо систем од двадесет пет диференцних једначина од којих пуну симетрију има једначина која одговара унутрашњим слојевима

$$\begin{aligned} \Phi_{n_y+1, n_z} + \Phi_{n_y-1, n_z} + \Phi_{n_y n_z+1} \Phi_{n_y n_z-1} - \rho \Phi_{n_y n_z} = 0 \\ n_y \in 2, 3, \dots, N_y - 2 ; \quad n_z \in 2, 3, \dots, N_z - 2 \end{aligned} \quad (4.8)$$

где је:

$$\rho = \frac{E - 6D - 2S \cos dk_x}{S} . \quad (4.9)$$

Преостале двадесет четири једначине одговарају граничним слојевима структуре. То значи да неки од Φ -ова из (4.8) недостају и до интеракције S и D имају поправке зависне од граничних услова [85].

Комплетан систем једначина за коефицијент Φ биће наведен после овога, али за идеalan случај, када се поправке граничних S и D занемарују.

На крају треба напоменути да оператори α^+ и α могу да имају произвољну кинематику јер, пошто се ради о једочестичној таласној функцији, систем једначина за коефицијенте таласних функција је независан од кинематике оператора.

Систем диференцних једначина за коефицијенте Φ у нултој апроксимацији (занемарују се поправке интеракција S и D у граничним слојевима) има облик:

$$\Phi_{10} + \Phi_{01} - R\Phi_{00} = 0 \quad (4.10)$$

$$\Phi_{N_y-1, N_z} + \Phi_{N_y N_z - 1} - R\Phi_{N_y N_z} = 0 \quad (4.11)$$

$$\Phi_{N_y-1, 0_z} + \Phi_{N_y 1} - R\Phi_{N_y} = 0 \quad (4.12)$$

$$\Phi_{1N_z} + \Phi_{0N_z-1} - R\Phi_{0N_z} = 0 \quad (4.13)$$

$$\Phi_{20} + \Phi_{11} + \Phi_{00} - R'\Phi_{10} = 0 \quad (4.14)$$

$$\Phi_{N_y-1, 1} + \Phi_{N_y 0} + \Phi_{N_y-2, 0} - R'\Phi_{N_y-1, 0} = 0 \quad (4.15)$$

$$\Phi_{00} + \Phi_{11} + \Phi_{02} - R'\Phi_{01} = 0 \quad (4.16)$$

$$\Phi_{0N_z} + \Phi_{1N_z-1} + \Phi_{0N_z-2} - R'\Phi_{0N_z-1} = 0 \quad (4.17)$$

$$\Phi_{0, N_z} + \Phi_{1N_z-1} + \Phi_{2N_z} - R'\Phi_{1N_z} = 0 \quad (4.18)$$

$$\Phi_{N_y-1, N_z-1} + \Phi_{N_y N_z} + \Phi_{N_y-2, N_z} - R'\Phi_{N_y-1, N_z} = 0 \quad (4.19)$$

$$\Phi_{N_y 0} + \Phi_{N_y -1,1} + \Phi_{N_y 2} - R' \Phi_{N_y 1} = 0 \quad (4.20)$$

$$\Phi_{N_y -1, N_z -1} + \Phi_{N_y N_z} + \Phi_{N_y N_z -2} - R' \Phi_{N_y N_z -1} = 0 \quad (4.21)$$

$$\Phi_{21} + \Phi_{01} + \Phi_{12} + \Phi_{10} - R'' \Phi_{11} = 0 \quad (4.22)$$

$$\Phi_{N_y 1} + \Phi_{N_y -2,1} + \Phi_{N_y -1,2} + \Phi_{N_y -1,0} - R'' \Phi_{N_y -1,1} = 0 \quad (4.23)$$

$$\Phi_{2, N_z -1} + \Phi_{0, N_z -1} + \Phi_{1, N_z} + \Phi_{1, N_z -2} - R'' \Phi_{1, N_z -1} = 0 \quad (4.24)$$

$$\Phi_{N_y N_z -1} + \Phi_{N_y -2, N_z -1} + \Phi_{N_y -1, N_z} + \Phi_{N_y -1, N_z -2} - R'' \Phi_{N_y -1, N_z -1} = 0 \quad (4.25)$$

$$\begin{aligned} \Phi_{n_y 1} + \Phi_{n_y +1,0} + \Phi_{n_y -1,0} - R' \Phi_{n_y 0} &= 0 \\ n_y &= 2, 3, \dots, N_y - 2 \end{aligned} \quad (4.26)$$

$$\begin{aligned} \Phi_{n_y, N_z -1} + \Phi_{n_y +1, N_z} + \Phi_{n_y -1, N_z} - R' \Phi_{n_y N_z} &= 0 \\ n_y &= 2, 3, \dots, N_y - 2 \end{aligned} \quad (4.27)$$

$$\begin{aligned} \Phi_{1 n_z} + \Phi_{0, n_z +1} + \Phi_{0, n_z -1} - R' \Phi_{0 n_z} &= 0 \\ n_z &= 2, 3, \dots, N_z - 2 \end{aligned} \quad (4.28)$$

$$\begin{aligned} \Phi_{N_y -1, n_z} + \Phi_{N_y, n_z +1} + \Phi_{N_y n_z -1} - R' \Phi_{N_y n_z} &= 0 \\ n_z &= 2, 3, \dots, N_z - 2 \end{aligned} \quad (4.29)$$

$$\begin{aligned} \Phi_{n_y +1,1} + \Phi_{n_y -1,1} + \Phi_{n_y 2} + \Phi_{n_y 0} - R'' \Phi_{n_y 1} &= 0 \\ n_y &= 2, 3, \dots, N_y - 2 \end{aligned} \quad (4.30)$$

$$\begin{aligned} \Phi_{n_y +1, N_z -1} + \Phi_{n_y -1, N_z -1} + \Phi_{n_y, N_z -2} + \Phi_{n_y N_z} - R'' \Phi_{n_y N_z -1} &= 0 \\ n_y &= 2, 3, \dots, N_y - 2 \end{aligned} \quad (4.31)$$

$$\begin{aligned} \Phi_{1, n_z +1} + \Phi_{1, n_z -1} + \Phi_{2 n_z} + \Phi_{0 n_z} - R'' \Phi_{1 n_z} &= 0 \\ n_z &= 2, 3, \dots, N_z - 2 \end{aligned} \quad (4.32)$$

$$\Phi_{N_y-1,n_z+1} + \Phi_{N_y-1,n_z-1} + \Phi_{N_y n_z} + \Phi_{N_y-2,n_z} - R'' \Phi_{N_y-1,n_z} = 0 \quad (4.33)$$

$n_z = 2, 3, \dots, N_z - 2$

$$\Phi_{n_y+1,n_z} + \Phi_{n_y-1,n_z} + \Phi_{n_y,n_z-1} - R'' \Phi_{n_y n_z} = 0 \quad (4.34)$$

$n_y = 2, 3, \dots, N_y - 2 \quad ; \quad n_z = 2, 3, \dots, N_z - 2$

где је:

$$R'' \equiv \rho = \frac{E - 6D - 2S \cos dk_x}{S}; \quad R' = \rho + \frac{D}{S} \quad ; \quad R = \rho + 2 \frac{D}{S} \quad (4.35)$$

У једначинама од (4.10) до (4.34) прелази се на континуум по формулама:

$$\begin{aligned} \Phi_{n_y n_z} &\rightarrow \Phi_{(y,z)}; \quad \Phi_{n_y \pm 1; n_z \pm 1} \rightarrow \Phi_{(y \pm d, z \pm d)} \\ N_y &\rightarrow L_y; \quad N_z \rightarrow L_z; \quad N_y \pm 1 \rightarrow L_y \pm d; \quad N_z \pm 1 \rightarrow L_z \pm d \\ \Phi_{n_y \pm 1, n_z} &\rightarrow \Phi_{(y \pm d, z)} \approx \Phi_{(y,z)} \pm d \frac{\partial \Phi}{\partial y} + \frac{1}{2} d^2 \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} \\ \Phi_{n_y, n_z \pm 1} &\rightarrow \Phi_{(y, z \pm d)} \approx \Phi_{(y,z)} \pm d \frac{\partial \Phi}{\partial z} + \frac{1}{2} d^2 \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2}. \end{aligned} \quad (4.36)$$

После преласка у континуум једначина (4.34) има облик:

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} + \frac{4 - \rho}{d^2} \Phi = 0; \quad \Phi = \Phi(x, y) \quad (4.37)$$

а преостале једначине (4.10) – (4.33) су облика:

$$\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} \Big|_{\substack{y=0 \\ z=0}} + \frac{1}{d} \frac{\partial \Phi}{\partial y} \Big|_{\substack{y=0 \\ z=0}} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} \Big|_{\substack{y=0 \\ z=0}} + \frac{1}{d} \frac{\partial \Phi}{\partial z} \Big|_{\substack{y=0 \\ z=0}} + \frac{2 - \rho - 2 \frac{D}{S}}{d^2} \Phi(0,0) = 0 \quad (4.38)$$

$$\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} \Big|_{\substack{y=L_y \\ z=L_z}} - \frac{1}{d} \frac{\partial \Phi}{\partial y} \Big|_{\substack{y=L_y \\ z=L_z}} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} \Big|_{\substack{y=L_y \\ z=L_z}} - \frac{1}{d} \frac{\partial \Phi}{\partial z} \Big|_{\substack{y=L_y \\ z=L_z}} + \frac{2 - \rho - 2 \frac{D}{S}}{d^2} \Phi(L_y, L_z) = 0 \quad (4.39)$$

$$\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} \Big|_{\substack{y=L_y \\ z=0}} - \frac{1}{d} \frac{\partial \Phi}{\partial y} \Big|_{\substack{y=L_y \\ z=0}} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} \Big|_{\substack{y=L_y \\ z=0}} + \frac{1}{d} \frac{\partial \Phi}{\partial z} \Big|_{\substack{y=L_y \\ z=0}} + \frac{2 - \rho - 2 \frac{D}{S}}{d^2} \Phi(L_y, 0) = 0 \quad (4.40)$$

$$\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} \Big|_{\substack{y=0 \\ z=L_z}} + \frac{1}{d} \frac{\partial \Phi}{\partial y} \Big|_{\substack{y=0 \\ z=L_z}} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} \Big|_{\substack{y=0 \\ z=L_z}} - \frac{1}{d} \frac{\partial \Phi}{\partial z} \Big|_{\substack{y=0 \\ z=L_z}} + \frac{2-\rho-2\frac{D}{S}}{d^2} \Phi_{(0,L_z)} = 0 \quad (4.41)$$

$$\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} \Big|_{\substack{y=0 \\ z=0}} + \frac{1}{d} \frac{\partial \Phi}{\partial z} \Big|_{\substack{y=0 \\ z=0}} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} \Big|_{\substack{y=d \\ z=0}} + \frac{3-\rho-\frac{D}{S}}{d^2} \Phi(d,0) = 0 \quad (4.42)$$

$$\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} \Big|_{\substack{y=L_y-d \\ z=0}} + \frac{1}{d} \frac{\partial \Phi}{\partial z} \Big|_{\substack{y=L_y-d \\ z=0}} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} \Big|_{\substack{y=L_y-d \\ z=0}} + \frac{3-\rho-\frac{D}{S}}{d^2} \Phi(L_y-d,0) = 0 \quad (4.43)$$

$$\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} \Big|_{\substack{y=0 \\ z=d}} + \frac{1}{d} \frac{\partial \Phi}{\partial y} \Big|_{\substack{y=0 \\ z=d}} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} \Big|_{\substack{y=0 \\ z=d}} + \frac{3-\rho-\frac{D}{S}}{d^2} \Phi_{(0,d)} = 0 \quad (4.44)$$

$$\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} \Big|_{\substack{y=0 \\ z=L_z-d}} + \frac{1}{d} \frac{\partial \Phi}{\partial y} \Big|_{\substack{y=0 \\ z=L_z-d}} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} \Big|_{\substack{y=0 \\ z=L_z-d}} + \frac{3-\rho-\frac{D}{S}}{d^2} \Phi_{(0,L_z-d)} = 0 \quad (4.45)$$

$$\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} \Big|_{\substack{y=d \\ z=L_z}} - \frac{1}{d} \frac{\partial \Phi}{\partial z} \Big|_{\substack{y=d \\ z=L_z}} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} \Big|_{\substack{y=d \\ z=L_z}} + \frac{3-\rho-\frac{D}{S}}{d^2} \Phi_{(d,L_z)} = 0 \quad (4.46)$$

$$\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} \Big|_{\substack{y=L_y-d \\ z=L_z}} - \frac{1}{d} \frac{\partial \Phi}{\partial z} \Big|_{\substack{y=L_y-d \\ z=L_z}} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} \Big|_{\substack{y=L_y-d \\ z=L_z}} + \frac{3-\rho-\frac{D}{S}}{d^2} \Phi_{(L_y-d,L_z)} = 0 \quad (4.47)$$

$$\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} \Big|_{\substack{y=L_y \\ z=d}} - \frac{1}{d} \frac{\partial \Phi}{\partial y} \Big|_{\substack{y=L_y \\ z=d}} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} \Big|_{\substack{y=L_y \\ z=d}} + \frac{3-\rho-\frac{D}{S}}{d^2} \Phi_{(L_y,d)} = 0 \quad (4.48)$$

$$\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} \Big|_{\substack{y=L_y \\ z=L_z-d}} - \frac{1}{d} \frac{\partial \Phi}{\partial y} \Big|_{\substack{y=L_y \\ z=L_z-d}} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} \Big|_{\substack{y=L_y \\ z=L_z-d}} + \frac{3-\rho-\frac{D}{S}}{d^2} \Phi_{(L_y,L_z-d)} = 0 \quad (4.49)$$

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} \Big|_{\substack{y=d \\ z=d}} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} \Big|_{\substack{y=d \\ z=d}} + \frac{4-\rho}{d^2} \Phi_{(1,1)} = 0 \quad (4.50)$$

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} \Big|_{\substack{y=L_y-d \\ z=d}} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} \Big|_{\substack{y=L_y-d \\ z=d}} + \frac{4-\rho}{d^2} \Phi_{(L_y-d, d)} = 0 \quad (4.51)$$

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} \Big|_{\substack{y=d \\ z=L_z-d}} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} \Big|_{\substack{y=d \\ z=L_z-d}} + \frac{4-\rho}{d^2} \Phi_{(d, L_z-d)} = 0 \quad (4.52)$$

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} \Big|_{\substack{y=L_y-d \\ z=L_z-d}} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} \Big|_{\substack{y=L_y-d \\ z=L_z-d}} + \frac{4-\rho}{d^2} \Phi_{(L_y-d, L_z-d)} = 0 \quad (4.53)$$

$$\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} \Big|_{z=0} + \frac{1}{d} \frac{\partial \Phi}{\partial z} \Big|_{z=0} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} \Big|_{z=0} + \frac{3-\rho - \frac{D}{S}}{d^2} \Phi_{(y,0)} = 0 \quad (4.54)$$

$$\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} \Big|_{z=L_z} - \frac{1}{d} \frac{\partial \Phi}{\partial z} \Big|_{z=L_z} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} \Big|_{z=L_z} + \frac{3-\rho - \frac{D}{S}}{d^2} \Phi_{(y, L_z)} = 0 \quad (4.55)$$

$$\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} \Big|_{y=0} + \frac{1}{d} \frac{\partial \Phi}{\partial y} \Big|_{y=0} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} \Big|_{y=0} + \frac{3-\rho - \frac{D}{S}}{d^2} \Phi_{(0, z)} = 0 \quad (4.56)$$

$$\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} \Big|_{y=L_y} - \frac{1}{d} \frac{\partial \Phi}{\partial y} \Big|_{y=L_y} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} \Big|_{y=L_y} + \frac{3-\rho - \frac{D}{S}}{d^2} \Phi_{(L_y, z)} = 0 \quad (4.57)$$

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} \Big|_{z=d} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} \Big|_{z=d} + \frac{4-\rho}{d^2} \Phi_{(y, d)} = 0 \quad (4.58)$$

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} \Big|_{z=L_z-d} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} \Big|_{z=L_z-d} + \frac{4-\rho}{d^2} \Phi_{(y, L_z-d)} = 0 \quad (4.59)$$

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} \Big|_{y=d} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} \Big|_{y=d} + \frac{4-\rho}{d^2} \Phi_{(d,z)} = 0 \quad (4.60)$$

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} \Big|_{y=L_y-d} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} \Big|_{y=L_y-d} + \frac{4-\rho}{d^2} \Phi_{(L_y-d,z)} = 0. \quad (4.61)$$

Једначина (4.37) задовољена је са два типа коефицијената:

$$\Phi_s(y, z) = F \sin k_y(y - f_s) \sin k_z(z - g_s) \quad (4.62)$$

и

$$\Phi_c(y, z) = G \cos k_y(y - f_c) \cos k_z(z - g_c) \quad (4.63)$$

Може се показати да синусна функција (4.62) задовољава све граничне једначине од (4.38) до (4.61), ако је:

$$\begin{aligned} k_y &= \frac{2\pi}{L_y - 2f_s} \nu_y \quad ; \quad k_z = \frac{2\pi}{L_z - 2g_s} \nu_z \\ \nu_y &= 1, 2, \dots, N_y + 1 \quad ; \quad \nu_z = 1, 2, \dots, N_z + 1 \\ \pi^2 d^2 (k_y^2 + k_z^2) &= 1 + \frac{D}{S} \\ f_s &= \frac{1}{k_y} \left[\operatorname{arcctg} \frac{\frac{1}{2} k_y^2 d^2 - 1 - \frac{D}{S}}{k_y d} + \mu_y \pi \right] \\ g_s &= \frac{1}{k_z} \left[\operatorname{arcctg} \frac{\frac{1}{2} k_z^2 d^2 - 1 - \frac{D}{S}}{k_z d} + \mu_z \pi \right] \\ \mu_y, \mu_z &\in (0, 1, 2, \dots) \end{aligned} \quad (4.64)$$

Што се тиче косинусне функције (4.63) она задовољава ове граничне једначине ако је:

$$\begin{aligned} k_y &= \frac{2\pi}{L_y - 2f_c} \nu_y \quad ; \quad k_z = \frac{2\pi}{L_z - 2g_c} \nu_z \\ \nu_y &= 0, 1, 2, \dots, N_y \quad ; \quad \nu_z = 0, 1, 2, \dots, N_z \\ \pi^2 d^2 (k_y^2 + k_z^2) &= 1 + \frac{D}{S} \end{aligned}$$

$$f_s = \frac{1}{k_y} \left[\operatorname{arctg} \frac{\frac{D}{S} + 1 - \frac{1}{2} k_y^2 d^2}{k_y d} + \mu_y \pi \right]$$

$$g_s = \frac{1}{k_z} \left[\operatorname{arctg} \frac{\frac{D}{S} + 1 - \frac{1}{2} k_z^2 d^2}{k_z d} + \mu_z \pi \right] \quad (4.65)$$

$$\mu_y, \mu_z \in (0, 1, 2, \dots)$$

Као што се види у идеалном случају (када се занемаре промене граничних интеракција) и у континуалној апроксимацији једночестична таласна функција елементарних побуђења у квантној жици може да се одреди аналитички, при чему је њена форма довољно проста. Овде нећемо наводити комплетну таласну функцију. То ће бити учињено у следећем параграфу, где ћемо анализирати различите типове побуђења у квантној жици. Као што ће се видети различити типови побуђења захтевају различите типове коефицијената у таласној функцији.

4.2. Простирање различитих типова побуђења кроз квантне жице

До сада смо користили хамилтонијан квантне жице у општој форми са ознакама D и S за интеракције. Овде ћемо специфицирати D и S за различите типове елементарних екситација.

У Хобардовом моделу [51] за електроне оператор \hat{T} има облик:

$$\begin{aligned} \hat{T}_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z} = & W_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z} \alpha^{+}_{n_x n_y n_z} \alpha_{n_x n_y n_z} - \\ & - W_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z} \alpha^{+}_{n_x n_y n_z} \alpha_{m_x m_y m_z} \end{aligned} \quad (4.66)$$

где су W и $-W$ величине које представљају јон-јон интеракцију, а α^+ и α Ферми оператори. Ово у апроксимацији најближих суседа води на:

$$D = W \quad ; \quad S = -W \quad (4.67)$$

Изотропни феромагнетик са спином $S = \frac{1}{2}$ има хамилтонијан изражен преко

Паули оператора [8]. У истој референци [8] методом Гринових функција нађене су енергије спинских таласа у self consistend field апроксимацији (апроксимација Тјабликова). Овом закону дисперзије уместо оригиналног паулионског хамилтонијана одговара еквивалентни бозонски хамилтонијан са оператором \hat{T} датим са:

$$\begin{aligned} \hat{T}_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z} = & \frac{1}{2}(1 - 2C_{m_x m_y m_z}) I_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z} \times \beta^{+}_{n_x n_y n_z} \beta_{n_x n_y n_z} - \\ & - \frac{1}{2}(1 - 2C_{n_x n_y n_z}) I_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z} \beta^{+}_{n_x n_y n_z} \beta_{m_x m_y m_z} \end{aligned} \quad (4.68)$$

где су C концентрације спинских талоса, I интеграли измене, β^+ и β Бозе оператори. Сагласно (4.68) можемо писати:

$$D = \frac{1}{2}(1 - 2C)I \quad ; \quad S = -\frac{1}{2}(1 - 2C)I \quad (4.69)$$

Оператори креације и анихилације Френкелових екситона за двонивовску шему молекуларних побуђења [6] су такође Паули оператори, па се од очигледног екситонског хамилтонијана:

$$H_{eks} = (\varepsilon_f - \varepsilon_0) \sum_{\vec{n}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}} + \sum_{\vec{n}\vec{m}} X_{\vec{n}\vec{m}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}} + \sum_{\vec{n}\vec{m}} Y_{\vec{n}\vec{m}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}} + \sum_{\vec{n}\vec{m}} Z_{\vec{n}\vec{m}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}} P_{\vec{m}}^+ P_{\vec{m}} \quad (4.70)$$

где је $\varepsilon_f - \varepsilon_0$ енергија побуђења изолованог молекула, а X, Y и Z матрични елементи дипол-диполне интеракције; истим поступком као и код Хајзенберговог феромагнета, може прећи на еквивалентни бозонски хамилтонијан [84]:

$$H_{eks}^{eq} = (\varepsilon_f - \varepsilon_0) \sum_{\vec{n}} \beta_{\vec{n}}^+ \beta_{\vec{n}} + \sum_{\vec{n}\vec{m}} (X_{\vec{n}\vec{m}} + 2Z_{\vec{n}\vec{m}} \tilde{C}_{\vec{m}}) \beta_{\vec{n}}^+ \beta_{\vec{n}} + \sum_{\vec{n}\vec{m}} (1 - 2\tilde{C}_{\vec{n}}) Y_{\vec{n}\vec{m}} \beta_{\vec{n}}^+ \beta_{\vec{m}} \quad (4.71)$$

где су β^+ и β Бозе оператори, а \tilde{C} концентрација екситона. Овде је оператор \hat{T} облика:

$$\hat{T}_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z} = [\varepsilon_f - \varepsilon_0 + X_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z} + 2Z_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z} \tilde{C}_{m_x m_y m_z}] \beta_{n_x n_y n_z}^+ \beta_{n_x n_y n_z} + (1 - 2\tilde{C}_{n_x n_y n_z}) Y_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z} \beta_{n_x n_y n_z}^+ \beta_{m_x m_y m_z} \quad (4.72)$$

што значи да је:

$$D = \varepsilon_f - \varepsilon_0 + X + 2z\tilde{C} \quad ; \quad S = (1 - 2\tilde{C})Y. \quad (4.73)$$

Конечно ћемо навести и еквивалентни хамилтонијан за фероелектрик КДП [83]. Према моделу из рада [83], овај хамилтонијан има облик:

$$H_{FE} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} J_{\vec{n}\vec{m}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}} - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} (\lambda_{\vec{n}\vec{m}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}} - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} J_{\vec{n}\vec{m}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}} P_{\vec{m}}^+ P_{\vec{m}} \quad (4.74)$$

где су J интеграли измене у квазиспинском моделу [13], док интеракција λ представља поправку квазиспинском моделу који је предложен у [13]. Еквивалентни хамилтонијан има облик [83]:

$$H_{FE}^{eq} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} (1 - 2\tilde{\tilde{C}}_{\vec{m}}) J_{\vec{n}\vec{m}} \beta_{\vec{n}}^+ \beta_{\vec{n}} - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} (1 - 2\tilde{\tilde{C}}_{\vec{n}} \lambda_{\vec{n}\vec{m}}) \beta_{\vec{n}}^+ \beta_{\vec{m}} \quad (4.75)$$

где су $\tilde{\tilde{C}}$ концентрације фероелектричних побуђења. Овде је \hat{T} облика:

$$\hat{T}_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z} = \frac{1}{2} (1 - 2\tilde{\tilde{C}}_{m_x m_y m_z}) J_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z} \beta_{n_x n_y n_z}^+ \beta_{n_x n_y n_z} - \frac{1}{2} (1 - 2\tilde{\tilde{C}}_{n_x n_y n_z}) \lambda_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z} \beta_{n_x n_y n_z}^+ \beta_{m_x m_y m_z} \quad (4.76)$$

тако да следи:

$$D = \frac{1}{2} (1 - 2\tilde{\tilde{C}}) J \quad ; \quad S = -\frac{1}{2} (1 - 2\tilde{\tilde{C}}) \lambda. \quad (4.77)$$

За даљу анализу понашања елементарних ексцитација у квантној жици битан је услов који се појављује и у (4.64) и у (4.65). Овај услов гласи:

$$\pi^2 d^2 [k_y^2 + k_z^2] = 1 + \frac{D}{S} \quad (4.78)$$

За случај електрона и спинских таласа (видети формуле (4.67) и (4.69)) види се да је:

$$\frac{D}{S} = -1 \quad (4.79)$$

То значи, према (4.78), да компоненте k_y и k_z за електроне и спинске таласе морају бити обе једнаке нули. Ово даље занчи да се за електроне и спинске таласе мора користити косинусна таласна функција (4.63), која када се нормира има облик:

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{N_x(N_y+1)(N_z+1)} \sum_{n_x n_y n_z} e^{ik_x d n_x} \gamma_{n_x n_y n_z}^+ |0\rangle \quad (4.80)$$

где γ^+ стоји уместо α^+ за електроне, односно β^+ за спинска побуђења.

Одавде се може закључити да импулси електрона и спинских таласа у квантној жици леже на правој у импулсном простору $P_y = P_z = 0$.

Код екситона однос $\frac{D}{S}$ је различит од -1 и може бити позитиван или негативан, али увек знатно већи од јединице ($\varepsilon_f - \varepsilon_0 \gg X, Y, Z$). Ако је $\frac{D}{S} > 0$, онда се екситони могу описивати било синусном било косинусном функцијом. У импулсном простору екситони леже на цилиндру веома великог радијуса основе чија је једначина:

$$P_y^2 + P_z^2 = (1 + \frac{D}{S}) \frac{\hbar^2}{\pi^2 d^2} \approx \frac{\varepsilon_f - \varepsilon_0}{|Y|} \frac{\hbar^2}{\pi^2 d^2} \quad (4.81)$$

Радијус цилиндра $R = \frac{\hbar}{\pi d} \sqrt{\frac{\varepsilon_f - \varepsilon_0}{|Y|}}$ је велики, будући да је величина $\varepsilon_f - \varepsilon_0$ за два па и три реда величине већа од матричног елемента Y .

За случај $\frac{D}{S} > 0$ нормирани таласна функција има облик:

$$|\Psi_s\rangle = \frac{2}{\sqrt{N_x N_y N_z}} \frac{1}{d^2} \sum_{n_x} \int_0^{L_y} dy \int_0^{L_z} dz e^{ik_x d n_x} \sin(k_y - f_s) \sin(k_z - g_s) \quad (4.82)$$

или:

$$|\Psi_s\rangle = \frac{2}{\sqrt{N_x N_y N_z}} \frac{1}{d^2} \sum_{n_x} \int_0^{L_y} dy \int_0^{L_z} dz e^{ik_x d n_x} \cos(k_y - f_c) \cos(k_z - g_c) \quad (4.83)$$

Треба нагласити да је фактор нормирања у ове две последње формуле добијен за случај да је $f \ll L_y$ и $g \ll L_z$.

Код фероелектричних побуђења величина λ је позитивна и знатно мања од J па је

$$1 + \frac{D}{S} < 0 \quad (4.84)$$

То значи да код фероелектрика не постоји периодично решење за таласну функцију, јер да би $(k_y^2 + k_z^2)$ било негативно, бар једна од компоненти мора бити чисто имагинарна. То значи да се у квантној жици фероелектрична побуђења просторно локализују. Каква је ова локализација, и каквом таласном функцијом треба описивати понашање фероелектричних побуђења у квантној жици представља питање која захтева детаљнију анализу.

Сумирајући резултате које смо овде навели можемо констатовати да се електрони и спинска побуђења простиру кроз квантну жицу као равни таласи дуж правца у коме је одржана трансляционна инваријантност. Екситонска побуђења описана су равним таласима дуж правца у коме је структура трансляционо инваријантна и стојећим таласима дуж остале два правца.

То значи да струја побуђења за сва три типа квазичестица треба да буде једнака и усмерена дуж правца X, јер стојећи таласи у остале два правца (код екситона) не шире сноп квазичестица у овим правцима. Овај закључак смо проверили испитујући густину струје вероватноће за електроне, спинске таласе и екситоне. На основу формулe (4.80), (4.82) и (4.83) добијен је за ова три типа квазичестица један те исти израз за струју вероватноће:

$$\vec{j} = \frac{\hbar k_x}{m} \vec{i} \quad (4.85)$$

где је \vec{i} опт k_x – осе.

4.3. Резиме изведенних резултата у континуалној апроксимацији

Анализа таласних функција елементарних побуђења у квантној жици извршена је у континуалној апроксимацији. Испоставило се да у овој апроксимацији таласна функција има релативно прост облик и представља комбинацију равних таласа у правцу осе X и стојећих таласа у правцу осе Y и у правцу осе Z . Компоненте таласног вектора k_y и k_z нису међусобно независне. Њихова међусобна веза битно зависи од динамичких карактеристика квантне жице тј. од међуатомских (међумолекулских) интеракција. Ова узајамна зависност компоненти таласног вектора не појављује се у цитираним радовима [60]–[73], иако се тамо користи континуална апроксимација.

Анализе су показале да се електрони и спински таласи простиру кроз квантну жицу као кроз једнодимензиону структуру, јер за њих мора бити $k_y = k_z = 0$.

Из теорије везаних стања се зна да када слободна побуђења зависе само од једне компоненте таласног вектора, онда су услови за стварање парова (бипобуђења) најповољнији [86], [87]. То значи да су у квантним жицама услови за стварање Куперових парова и бимагнона далеко повољнији него у масивним структурама.

За Френкелове екситоне таласна функција може да буде комбинација равних и стојећих таласа само ако је дипол–диполна интеракција која карактерише пренос побуђења са чвора на чвор позитивног знака ($Y>0$). Ово са своје стране значи да периодична решења за коефицијенте таласне функције могу имати само екситони са негативном ефективном масом. За екситоне са позитивном ефективном масом и фероелектрична побуђења бар једна од компонената таласног вектора мора бити негативна, а то значи да се ова побуђења просторно локализују у квантној жици.

4.4. Фонони у структурама ограниченим у све три димензије (квантне тачке)

Под микрочиповима, или квантним тачкама [89], подразумеваћемо структуре које дуж сваког правца имају свега неколико атомских слојева. Технологија синтезе танких филмова, квантних жица и квантних тачака узапредовала је у последње време до те мере да се могу правити структуре са свега три или четири атомска слоја [90]. Овакве структуре имају специфичне физичке и термодинамичке особине од којих је свакако најинтересантнија чињеница да је за побуђивање фонона у ограниченој структури потребна извесна активациона енергија која је утолико већа уколико су размере структуре мање [46], [48], [76], [91].

У раду [92] испитане су квантне жице (структуре које су у две димензије коначне) и испоставило се да анализа оваквих структура у дискретној слици повлачи за собом 24 гранична услова и одговарајући број граничних једначина. Код квантних тачака би при дискретној анализи број граничних једначина био далеко већи што би крајње отежало математичку анализу система. Због тога ћемо у овом параграфу анализирати фононски подсистем у микрочиповима у континуалној репрезентацији, тј. решаваћемо хиперболичку једначину таласног кретања за различите граничне и почетне услове. Предмет истраживања ће бити микрочип у облику квадра чије су димензије четири до пет атомских слојева и цилиндрични микрочип сличних димензија као и микрочип у облику квадра. Биће испитани молекулски помераји, фононске енергије и унутрашња енергија обрачуната на један атом.

Хамилтонијан система механичких осцилација код кога су занемарени торзиони ефекти има облик [5]:

$$H = \sum_{n_x, n_y, n_z} \frac{p_{n_x, n_y, n_z}^2}{2M} + \frac{C_H}{4} \sum_{n_x, n_y, n_z; \lambda} \left[(u_{n_x + \lambda, n_y, n_z} - u_{n_x, n_y, n_z})^2 + (u_{n_x, n_y + \lambda, n_z} - u_{n_x, n_y, n_z})^2 + (u_{n_x, n_y, n_z + \lambda} - u_{n_x, n_y, n_z})^2 \right]; \quad \lambda = 1, -1 \quad (4.86)$$

где је M маса молекула, C_H Хукова константа на истезање, u молекулски померај и p одговарајући импулс.

Ако се Хајзенбергова једначина кретања за молекулски померај:

$$\dot{u}_{n_x, n_y, n_z} = \frac{1}{i\hbar} [u_{n_x, n_y, n_z}, H], \quad (4.87)$$

диференцира по времену и искористи Хајзенбергова једначина за импулс долази се до следеће диференцне једначине за молекулске помераје:

$$\ddot{u}_{n_x, n_y, n_z} = \frac{C_H}{M} \left(u_{n_x+1, n_y, n_z} + u_{n_x-1, n_y, n_z} - 2u_{n_x, n_y, n_z} + u_{n_x, n_y+1, n_z} + u_{n_x, n_y-1, n_z} - 2u_{n_x, n_y, n_z} + u_{n_x, n_y, n_z+1} + u_{n_x, n_y, n_z-1} - 2u_{n_x, n_y, n_z} \right). \quad (4.88)$$

У овој једначини прећи ћемо на континуум користећи формулу:

$$u_{n_x+1} + u_{n_x-1} - 2u_{n_x} \rightarrow u + a \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{2} a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + u - a \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{2} a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - 2u = a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (4.89)$$

где је a константа решетке. На тај начин долазимо до диференцијалне једначине:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \nu^2 \Delta u; \quad u^2 \frac{C_H}{M} = \nu^2; \quad u = u(x, y, z, t) \quad (4.90)$$

За структуру у облику квадра са ивицама L_x, L_y, L_z једначину (4.90) ћемо решавати за граничне услове:

$$u(0, y, z, t) = u(L_x, y, z, t) = u(x, 0, z, t) = u(x, L_y, z, t) = u(x, y, 0, t) = u(x, y, L_z, t) = 0 \quad (4.91)$$

при чему је претпостављено да се један рогаљ квадра налази у координатном почетку.

Почетни услови ће бити узети у облику:

$$u(x, y, z, 0) = \phi(x, y, z); \quad \left. \frac{\partial u}{\partial t} \right|_{t=0} = 0 \quad (4.92)$$

Једначину (4.90) решаваћемо методом раздвајања променљивих. То значи да ћемо узети

$$u(x, y, z, t) = \Psi(t) a(x) b(y) c(z) \quad (4.93)$$

после чега следи

$$\frac{1}{\nu^2} \frac{1}{\Psi} \frac{d^2 \Psi}{dt^2} = \frac{1}{a} \frac{d^2 a}{dx^2} + \frac{1}{b} \frac{d^2 b}{dy^2} + \frac{1}{c} \frac{d^2 c}{dz^2} = -k_x^2 - k_y^2 - k_z^2 \equiv -k^2. \quad (4.94)$$

Одавде следе једначине:

$$\frac{d^2\Psi}{dt^2} + k^2\nu^2\Psi = 0$$

$$\frac{d^2a}{dx^2} + k_x^2a = 0; \quad \frac{d^2b}{dy^2} + k_y^2b = 0; \quad \frac{d^2c}{dz^2} + k_z^2c = 0. \quad (4.95)$$

Због почетних услова (4.92) временски део решења садржи само косинусну функцију

$$\Psi = \rho_k \cos(\nu k t). \quad (4.96)$$

Решења просторних једначина дата су у облику:

$$a_{k_x}(x) = C_1(k_x)e^{ixk_x} + C_2(k_x)e^{-ixk_x}$$

$$b_{k_y}(y) = C_3(k_y)e^{iyk_y} + C_4(k_y)e^{-iyk_y} \quad (4.97)$$

$$c_{k_z}(z) = C_5(k_z)e^{izk_z} + C_6(k_z)e^{-izk_z}.$$

Ако применимо граничне услове (4.91) онда се компоненте таласног вектора квантују:

$$k_x = \frac{\pi}{L_x}\nu_x; \quad k_y = \frac{\pi}{L_y}\nu_y; \quad k_z = \frac{\pi}{L_z}\nu_z \quad (4.98)$$

а решења су:

$$a_{\nu_x}(x) = \frac{1}{2}\alpha_{\nu_x} \sin\left(\frac{\pi}{L_x}\nu_x x\right)$$

$$b_{\nu_y}(y) = \frac{1}{2}\beta_{\nu_y} \sin\left(\frac{\pi}{L_y}\nu_y y\right) \quad (4.99)$$

$$c_{\nu_z}(z) = \frac{1}{2}\gamma_{\nu_z} \sin\left(\frac{\pi}{L_z}\nu_z z\right).$$

Због (4.99) индекси ν_x, ν_y, ν_z не смеју имати вредност нула, што како ћемо касније видети има веома значајне физичке реперкусије. За коефицијенте α, β и γ претпоставићемо следеће услове симетрије:

$$\alpha_{-\nu_x} = -\alpha_{\nu_x}; \quad \beta_{-\nu_y} = -\beta_{\nu_y}; \quad \gamma_{-\nu_z} = -\gamma_{\nu_z}. \quad (4.100)$$

Општи израз за молекулски померај може се записати у облику:

$$u(x, y, z, t) = \sum_{\nu_x=1}^{\infty} \sum_{\nu_y=1}^{\infty} \sum_{\nu_z=1}^{\infty} \alpha_{\nu_x} \beta_{\nu_y} \gamma_{\nu_z} \sin\left(\frac{\pi \nu_x}{L_x} x\right) \cdot \sin\left(\frac{\pi \nu_y}{L_y} y\right) \sin\left(\frac{\pi \nu_z}{L_z} z\right) \cos(k \nu t). \quad (4.101)$$

Ако искористимо услов ортогоналности:

$$\int_0^L d\xi \sin\left(\frac{\pi n}{L} \xi\right) \sin\left(\frac{\pi m}{L} \xi\right) = \frac{L}{2} \delta_{nm} \quad (4.102)$$

и почетни услов (4.91) долазимо до израза за померај:

$$u(x, y, z, t) = \frac{8}{L_x L_y L_z} \sum_{\nu_x, \nu_y, \nu_z=1}^{\infty} A_{\nu_x, \nu_y, \nu_z} \sin\left(\frac{\pi \nu_x}{L_x} x\right) \cdot \sin\left(\frac{\pi \nu_y}{L_y} y\right) \sin\left(\frac{\pi \nu_z}{L_z} z\right) \cos(k \nu t), \quad (4.103)$$

где је

$$k = \sqrt{\frac{\pi^2 \nu_x^2}{L_x^2} + \frac{\pi^2 \nu_y^2}{L_y^2} + \frac{\pi^2 \nu_z^2}{L_z^2}} \quad (4.104)$$

и

$$A_{\nu_x, \nu_y, \nu_z} = \int_0^{L_x} dx \int_0^{L_y} dy \int_0^{L_z} dz \phi(x, y, z) \sin\left(\frac{\pi \nu_x}{L_x} x\right) \sin\left(\frac{\pi \nu_y}{L_y} y\right) \sin\left(\frac{\pi \nu_z}{L_z} z\right). \quad (4.105)$$

Диференцирањем (4.103) по времену и множењем са масом можемо наћи молекулске импулсе. Одговарајуће изразе нећемо наводити. Много је интересантније за праксу да одредимо фононску енергију и минималну фононску енергију.

Фононска енергија је дата изразом:

$$E = \hbar \nu k = \hbar \nu \sqrt{\frac{\pi^2 v_x^2}{L_x^2} + \frac{\pi^2 v_y^2}{L_y^2} + \frac{\pi^2 v_z^2}{L_z^2}} ; \quad \min .v_x, v_y, v_z = 1 . \quad (4.106)$$

Минимална фононска енергија добија се из (4.106) за $v_x = v_y = v_z = 1$. Ми ћемо узети уместо квадра коцку ($L_x = L_y = L_z \equiv L$) и тада је минимална фононска енергија:

$$E_{\min.} = \frac{\hbar \nu \pi \sqrt{3}}{L} . \quad (4.107)$$

Ако претпоставимо да наш кубни чип садржи четири атомска слоја са константом решетке $a = 4 \cdot 10^{-10} m$, онда је $L = 12 \cdot 10^{-10} m$. Узећемо да је брзина звука $5 \cdot 10^3 m/s$. Тада се добија минимална енергија $2,39 \cdot 10^{-21} J$. Овоме одговара температура активације фонона од 173K. То другим речима значи да се електрони у оваквом чипу до 173K крећу суперпроводно јер реална нула овог система је 173K. Овај резултат наводи на идеју да се високотемпературски суперпроводници конструишу као структуре састављене од низа међусобно одвојених кубних чипова чије су линеарне размере реда $10^{-9} m$.

Ако анализирамо микрочип цилиндричног облика, онда једначину (4.90) морамо решавати у цилиндричним координатама. Лапласов оператор у цилиндричним координатама има облик [9]:

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} . \quad (4.108)$$

У овом случају једначина (4.90) се своди на:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \nu^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial u}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 u}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right); \quad u = u(\rho, \varphi, z, t) . \quad (4.109)$$

За цилиндрични чип ћемо претпоставити да му је полу пречник основе R и висина H . Границе услове формулисаћемо на следећи начин:

$$u(R, \varphi, z, t) = 0 \quad (4.110)$$

$$u(\rho, \varphi, H, t) = u(\rho, \varphi, 0, t) = 0 \quad (4.111)$$

$$u(\rho, \varphi, z, t) = u(\rho, \varphi + 2\pi, z, t). \quad (4.112)$$

Услов (4.112) представља истовремено и услов једнозначности функције u .

Почетне услове узећемо слично претходном случају:

$$u(\rho, \varphi, z, 0) = F(\rho, \varphi, z); \quad \left. \frac{\partial u}{\partial t} \right|_{t=0} = 0. \quad (4.113)$$

Једначину (4.109) решаваћемо методом раздвајања променљивих, тј. узећемо

$$u(\rho, \varphi, z, t) = \zeta(t) \Lambda(\rho, \varphi, z). \quad (4.114)$$

Заменом (4.114) у (4.109) добијамо:

$$\frac{1}{\nu^2} \frac{1}{\zeta} \frac{d^2 \zeta}{dt^2} = \frac{\Delta \Lambda}{\Lambda} = -k_x^2 - k_y^2 - k_z^2 \equiv -k^2. \quad (4.115)$$

Временски део помераја одређује се из једначине:

$$\frac{d^2 \zeta}{dt^2} + \nu^2 k^2 \zeta = 0 \quad (4.116)$$

и с обзиром на почетни услов (4.113) узимамо партикуларно решење

$$\zeta(t) = \mu_k \cos(\nu kt). \quad (4.117)$$

У једначини:

$$\frac{\Delta \Lambda}{\Lambda} = -k_x^2 - k_y^2 - k_z^2 \quad (4.118)$$

uzeћемо

$$\Lambda(\rho, \varphi, z) = f(\rho) G(z) \cos(m\varphi). \quad (4.119)$$

Треба нагласити да је функција $\cos(m\varphi)$ уведена због услова једнозначности (3.5). Одабрана је косинусна функција да би била обухваћена и могућност $m=0$ која одговара неком изотропном решењу.

После смене (4.119) једначина (4.118) се распада на две једначине:

$$\rho^2 \frac{d^2 f}{d\rho^2} + \rho \frac{df}{d\rho} + (q^2 \rho^2 - m^2) f = 0, \quad (4.120)$$

где је

$$q^2 = k_x^2 + k_y^2 \quad (4.121)$$

и

$$\frac{d^2 G}{dz^2} + k_z^2 G = 0. \quad (4.122)$$

Решење једначине (4.122) је облика:

$$G_{k_z}(z) = C_1(k_z) e^{izk_z} + C_2(k_z) e^{-izk_z}. \quad (4.123)$$

С обзиром на граничне услове (4.111) k_z је квантован:

$$k_z = \frac{\pi \nu_z}{H}. \quad (4.124)$$

Решење (4.123) при услову (4.124) мора бити синусна функција, тј.

$$G_{\nu_z} = \gamma_{\nu_z} \sin\left(\frac{\pi \nu_z}{H} z\right); \quad \nu_z = \pm 1, \pm 2, \dots . \quad (4.125)$$

Као што се види и овде индекс ν не сме да узима вредност нула јер би иначе цео померај био једнак нули.

После смене $q\rho = r$ једначина (4.120) постаје Беселова једначина са целобројним индексом m , тако да је њено решење:

$$f = J_m(q\rho), \quad (4.126)$$

где је J_m Беселова функција индекса m . Границни услов (4.110) се своди на

$$J_m(qR) = 0 \quad (4.127).$$

што за q даје вредности:

$$q = \frac{x_{m,s}}{R}; \quad s = 1, 2, 3, \dots, \quad (4.128)$$

где су $x_{m,s}$ нуле Беселових функција индекса m .

С обзиром на добијене резултате општи израз за померај можемо писати као:

$$u(\rho, \varphi, z, t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{2} \tilde{\alpha}_m \cos(m\varphi) \sum_{\nu_z=-\infty}^{\infty} \frac{1}{2} \tilde{\beta}_{\nu_z} \sin\left(\frac{\nu_z \pi z}{H}\right) \sum_{s=1}^{\infty} \tilde{\gamma}_s J_m\left(x_{m,s} \frac{\rho}{R}\right) \cdot \cos(\nu_z t) \sqrt{\left(\frac{x_{m,s}}{R}\right)^2 + \left(\frac{\pi \nu_z}{H}\right)^2}. \quad (4.129)$$

За коефицијенте ћемо узети услове симетрије:

$$\tilde{\alpha}_{-m} = \tilde{\alpha}_m; \quad \tilde{\beta}_{-\nu_z} = -\tilde{\beta}_{\nu_z}. \quad (4.130)$$

Пошто за Беселове функције целобројног индекса важи услов:

$$J_{-m} = (-1)^m J_m, \quad (4.131)$$

формула (4.129) се своди на:

$$u(\rho, \varphi, z, t) = \frac{1}{2} \tilde{\alpha}_0 \sum_{\nu_z=1}^{\infty} \tilde{\beta}_{\nu_z} \sin\left(\frac{\nu_z \pi}{H} z\right) \sum_{s=1}^{\infty} \tilde{\gamma}_s J_0\left(x_{0,s} \frac{\rho}{R}\right) \cos(\nu_z t) \sqrt{\left(\frac{x_{0,s}}{R}\right)^2 + \left(\frac{\nu_z \pi}{H}\right)^2} + \\ + \sum_{m=1}^{\infty} \tilde{\alpha}_{2m} \cos(2m\varphi) \sum_{\nu_z=1}^{\infty} \tilde{\beta}_{\nu_z} \sin\left(\frac{\nu_z \pi}{H} z\right) \sum_{s=1}^{\infty} \tilde{\gamma}_s J_{2m}\left(x_{2m,s} \frac{\rho}{R}\right) \cdot \cos(\nu_z t) \sqrt{\left(\frac{x_{2m,s}}{R}\right)^2 + \left(\frac{\nu_z \pi}{H}\right)^2}. \quad (4.132)$$

Даље ћемо користити услове ортогоналности:

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \cos 2m\varphi \cos 2n\varphi = 2\pi \delta_{nm} \quad (4.133)$$

и услов (4.101). Услов ортогоналности за Беселове функције је [10]:

$$\int_0^1 d\xi \xi J_m(x_i \xi) J_m(x_k \xi) = \frac{1}{2} [J'_m(x_i)]^2 \delta_{ik}, \quad (4.134)$$

где је J'_m први извод Беселове функције J_m .

Применом ових услова на (4.132) налазимо:

$$u(\rho, \varphi, z, t) = \sum_{v_z=1}^{\infty} \sum_{s=1}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} N_{v_z, s, m} J_{2m} \left(x_{2m, s} \frac{\rho}{R} \right) \sin \left(\frac{v_z \pi}{H} z \right) \cos(2m\varphi) \cos(k v_z t), \quad (4.135)$$

где је

$$N_{v_z, s, m} = \frac{2}{\pi R^2 H} \frac{1}{[J'_{2m}(x_{2m, s})]^2} \int_0^R d\rho \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^H dz \rho F(\rho, \varphi, z) \cdot \\ \cdot J_{2m} \left(x_{2m, s} \frac{\rho}{R} \right) \cos(2m\varphi) \sin \left(\frac{v_z \pi}{H} z \right) \quad (4.136)$$

и

$$k = \sqrt{\left(\frac{x_{2m, s}}{R} \right)^2 + \left(\frac{v_z \pi}{H} \right)^2}. \quad (4.137)$$

Као и у случају кубног чипа треба одредити енергију фонона и минималну енергију.

Енергија фонона у цилиндричном чипу дата је са:

$$E = \hbar v \sqrt{\left(\frac{x_{2m, s}}{R} \right)^2 + \left(\frac{v_z \pi}{H} \right)^2}. \quad (4.138)$$

Најнижа вредност ν_z је једнака јединици док Беселове функције за $m \neq 0$ имају најнижу нулу $x_1 = 0$. То значи да је најнижа енергија фонона у цилиндричном чипу

$$E_{\min} = \hbar \nu \frac{\pi}{H}. \quad (4.139)$$

Ако узмемо да је $\nu = 5 \cdot 10^3 \text{ m/s}$ и $H = 12 \cdot 10^{-10} \text{ m}$ добијамо $E_{\min} = 1,38 \cdot 10^{-21} \text{ J}$. Ово одговара температурама на којима се побуђују фонони $T=100K$.

Овде треба обратити пажњу на чињеницу да облик фононског помераја касо и енергија фонона зависе од почетног услова (4.113). Ако почетни услов не зависи од поларног угла онда у (4.135) од суме по m остаје само први члан и померај је изотропан у равни:

$$u(\rho, z, t) = \sum_{\nu_z=1}^{\infty} \sum_{s=1}^{\infty} N_{\nu_z, s, 0} J_0\left(x_{0,s} \frac{\rho}{R}\right) \sin\left(\frac{\nu_z \pi}{H} z\right) \cos(k \nu t). \quad (4.140)$$

Величина \tilde{k} дата је са

$$\tilde{k} = \sqrt{\left(\frac{x_{0,s}}{R}\right)^2 + \left(\frac{\nu_z \pi}{H}\right)^2}. \quad (4.141)$$

Енергија изотропних фонона дата је са $E = \hbar \nu \tilde{k}$, али је минимална енергија знатно већа него код анизотропних фонона јер је најнижа нула Беселове функције нултог индекса једнака

$$x_{0,1} = 2,405. \quad (4.142)$$

Пошто је минимална вредност ν_z једнака јединици минимална енергија изотропних фонона је дата са

$$E_{\min} = \hbar \nu \sqrt{\left(\frac{2,405}{R}\right)^2 + \left(\frac{\pi}{H}\right)^2}. \quad (4.143)$$

Ако узмемо да је $R = \frac{H}{2} = 6 \cdot 10^{-10} \text{ m}$ (равностран ваљак) онда минимална енергија изотропних фонона износи $2,525 \cdot 10^{-21} \text{ J}$. То значи да су за побуђивање изотропних фонона потребни топлотни квантни који одговарају температурама од $183K$.

Може се закључити да је за побуђивање изотропних фонона у цилиндричном чипу потребна виша температура него за побуђивање анизотропних фонона. Такође је теже побудити аанизотропне фононе него фононе у кубном чипу сличних размера.

Као што смо видели, фонони у микрочиповима имају релативно висок геп, што са своје стране утиче на величину унутрашње енергије и специфичне топлоте. Овде ћемо поредити унутрашње енергије обрачунате на један атом у чиповима и у бесконачној структури.

Формула за унутрашњу енергију по једном атому и за једну фононску грану гласи:

$$U = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar V k}{e^{\frac{\hbar V k}{\theta}} - 1}; \quad \theta = k_B T; \quad k = |\vec{k}|. \quad (4.144)$$

Овде је N број атома у структури који је веома велики за бесконачну структуру, а константа θ за чипове. Вектор \vec{k} има N вредности. Правило за прелазак суме по таласном вектору на интеграл гласи:

$$\sum_{\vec{k}} \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3 \vec{k} \quad (4.145)$$

где је V запремина система. Ако је константа решетке a , онда је $V = N \cdot a^3$. Ако искористимо ово и формулу (4.145) за унутрашњу енергију по једном атому из формуле (4.144) добијамо:

$$U = \frac{a^3}{8\pi^3} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_{k_{\min}}^{k_{\max}} dk k^2 \frac{\hbar V k}{e^{\frac{\hbar V k}{\theta}} - 1}. \quad (4.146)$$

Ако искористимо формулу:

$$\frac{1}{e^x - 1} = \frac{e^{-x}}{1 - e^{-x}} = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-nx}, \quad (4.147)$$

онда се после интеграције по угловима (4.146) може написати као:

$$U = \frac{\hbar V a^3}{2\pi^2} \sum_{n=1}^{\infty} \int_{k_{\min}}^{k_{\max}} dk k^3 e^{-\frac{n\hbar V}{\theta} k}. \quad (4.148)$$

За кубни чип је, према подацима из претходног параграфа:

$$k_{\min} = \frac{\pi\sqrt{3}}{12} \cdot 10^{10} m^{-1}; \quad k_{\max} = \frac{\pi\sqrt{3}}{4} \cdot 10^{10} m^{-1}. \quad (4.149)$$

За цилиндрични чип је:

$$k_{\min} = \frac{\pi}{12} \cdot 10^{10} m^{-1}; \quad k_{\max} = \sqrt{\left(\frac{7,588}{6}\right)^2 + \left(\frac{\pi}{4}\right)^2} \cdot 10^{10} m^{-1} = 1,49 \cdot 10^{10} m^{-1}. \quad (4.150)$$

Број 7,588 представља другу нулу Беселове функције.

За бесконачну структуру је $k_{\min} = 0$, док је k_{\max} дато формулом (4.149).

Ако уведемо смену:

$$\frac{n\hbar V}{\theta} k = \xi, \quad (4.151)$$

онда се (4.148) своди на:

$$U = \frac{a^3 \hbar V}{2\pi^2} \left(\frac{k_B T}{\hbar V} \right)^4 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^4} \int_{\xi_{\min}}^{\xi_{\max}} d\xi \xi^3 e^{-\xi}, \quad (4.152)$$

где је:

$$\xi_{\min} = \frac{n\hbar V}{\theta} k_{\min}; \quad \xi_{\max} = \frac{n\hbar V}{\theta} k_{\max}. \quad (4.153)$$

После решавања интеграла, унутрашња енергија за кубни чип дата је формулом:

$$U_1 = \frac{a^3 \hbar V}{2\pi^2} \left(\frac{k_B T}{\hbar V} \right)^4 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^4} e^{-P_n} \left\{ P_n^3 + 3P_n^2 + 6P_n + 6 - \left(Q_n^3 + 3Q_n^2 + 6Q_n + 6 \right) e^{-(Q_n - P_n)} \right\}, \quad (4.154)$$

где је:

$$P_n = \frac{n\hbar V}{k_B T} \frac{\pi\sqrt{3}}{12} \cdot 10^{10}; \quad Q_n = \frac{n\hbar V}{k_B T} \frac{\pi\sqrt{3}}{4} \cdot 10^{10}. \quad (4.155)$$

За цилиндрични чип одговарајућа формула гласи:

$$U_2 = \frac{a^3 \hbar V}{2\pi^2} \left(\frac{k_B T}{\hbar V} \right)^4 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^4} e^{-W_n} \left\{ V_n^3 + 3V_n^2 + 6V_n + 6 - \left(S_n^3 + 3S_n^2 + 6S_n + 6 \right) e^{-(S_n - W_n)} \right\}, \quad (4.156)$$

где је:

$$W_n = \frac{n \hbar V}{k_B T} \frac{\pi}{12} \cdot 10^{10}; \quad S_n = \frac{n \hbar V}{k_B T} \sqrt{\left(\frac{7,588}{6} \right)^2 + \left(\frac{\pi}{4} \right)^2} \cdot 10^{10}. \quad (4.157)$$

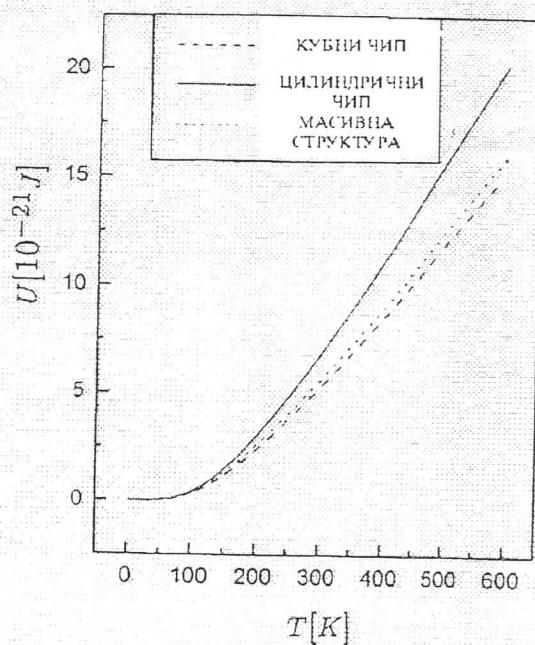
За бесконачну структуру унутрашња енергија по једном атому дата је формулом:

$$U_3 = \frac{a^3 \hbar V}{2\pi^2} \left(\frac{k_B T}{\hbar V} \right)^4 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^4} \left\{ - \left(D_n^3 + 3D_n^2 + 6D_n + 6 \right) e^{-D_n} \right\}, \quad (4.158)$$

где је $D_n = Q_n$. Треба нагласити да се у Дебајевој теорији у области ниских температура узима да $D_n \rightarrow \infty$ јер садржи темпертуру у имениоцу, па Дебајева формула гласи:

$$U_D = \frac{a^3 \hbar V}{2\pi^2} \left(\frac{k_B T}{\hbar V} \right)^4 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^4}; \quad \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^4} = \frac{\pi^4}{90}. \quad (4.159)$$

Графици функција U_1 , U_2 и U_3 за $V = 5 \cdot 10^3 m/s$ дати су на слици 4. Види се да најнижу унутрашњу енергију има кубни чип. Што се тиче цилиндричног чипа и бесконачне структуре графици за унутрашњу енергију се пресецају на $90K$ при

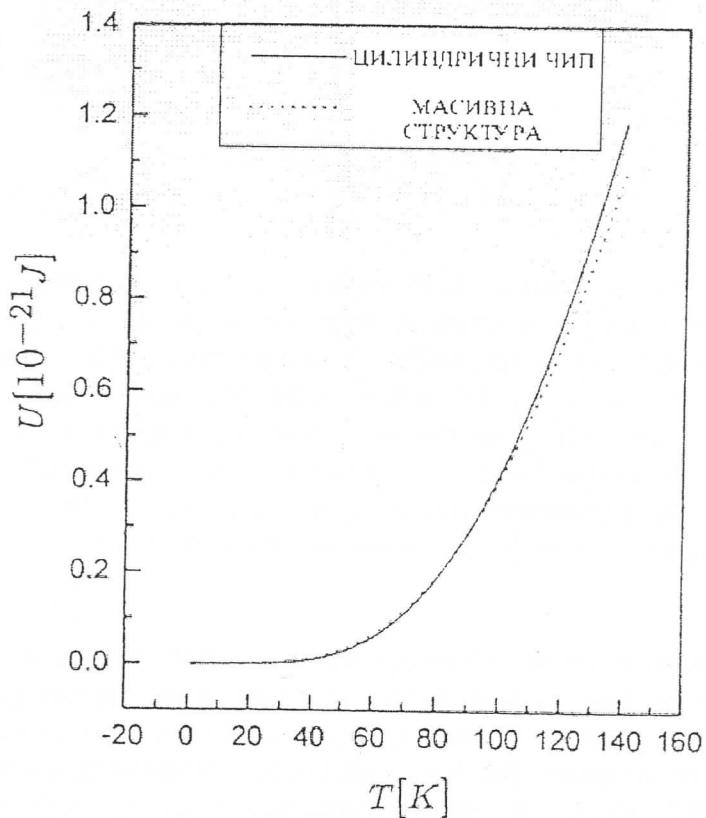


Слика 4

Графици зависности унутрашњих енергија U_1 , U_2 и U_3 од температуре

чему је $U_2 < U_3$ за $T \in (0K, 90K)$ и $U_2 > U_3$ за $T > 90K$. Треба свакако напоменути да је слично пресецање графика за филм и масивну структуру добијено у раду [94].

На слици 5 дат је део графика са слике 4 где се боље види област пресека кривих U_2 и U_3 .



Слика 5

Пресек $\bar{\gamma}$ рафика унутрашњих енергија
за цилиндрични чип и масивну структуру

Изведена анализа указала је да квантне тачке или микрочипови имају интересантна и за праксу значајне осцилаторне карактеристике. Најзначајнији резултат је чињеница да је за побуђивање фонона у чиповима потребна знатна топлотна енергија побуђивања која за веома мале микрочипове одговара температурама течног азота. Овај резултат је веома интересантан са тачке гледишта синтезе суперпроводних структура. Према наведеним резултатима у структури комбинованој од кубних микрочипова не би било механичких осцилација све до $180K$ што другим речима значи да би се електрони до ових температура кретали без отпора. Наравно технологија синтезе оваквих структура свакако није једноставна и захтева много инвенције и умешности.

ЗАКЉУЧАК

Резимирајући резултате дисертације може се рећи да квантне жице представљају веома широко поље истраживања и да су као предмет истраживања све популарније. У врло кратком року објављен је низ радова [95] - [115], који су посвећени проблематици квантних жица. Испитују се локализована стања у металним и полуправодничким квантним жицама, затим транспортни коефицијенти, квантни Холов ефекат, концентрација и транспорт оптичких побуђења и још низ других ефеката. Овако повишен интерес за проблематику квантних жица изазван је очекивањима да ефекти у овим структурима нађу непосредну примену.

Што се тиче резултата саме дисертације треба истаћи да је она заснована на чисто микротеоријском прилазу, који можда уноси велике математичке потешкоће, али је зато реалистичнији од семикласичних прилаза који се обично користе. Анализе извршене у континуалној апроксимацији довеле су до неких интересантних закључака. Испоставило се да неки типови елементарних побуђења не могу да се појаве у квантним жицама. Овај закључак важи само за случај који је испитан у дисертацији, а у њему су занемарене поправке граничних матричних елемената. Из наведених премиса да се извести закључак да је настанак неких побуђења у квантним жицама инициран граничним условима.

У дисертацији су испитани фонони у квантним тачкама. Коришћена је континуална апроксимација и констатовано је да активациона енергија за фононе одговара енергијама од око сто Болцманових константи. Ово другим речима значи да су квантне тачке „замрзнуте“ до $100K$ и да се у њима могу очекивати високотемпературски суперпроводни ефекти.

На крају треба шире прокоментарисати резултате добијене за квантне жице за четири и три нити. Констатовано је да неке нити нису „пропусне“ за квазичестице неких одређених енергија. Оваке забране указују да у квантним жицама морају постојати и локализована стања (попут површинских побуђења у филмовима).

Квантна жица са три нити аналогна је алфа протеинима који се третирају као сиситет са три једнодимензионе подрешетке. Према Скотовом моделу [78] пептидне групе алфа протеина распоређене су по теменима једнакостраничног троугла, што значи да према овом моделу алфа протеини поседују цикличну инваријантност. У раду [79] је показано да због цикличне инваријантности у протеинима не могу да егзистирају антисиметрични солитони за које се сматра да су један од ослонаца живота и да играју значајну улогу у биоенергетици. Циклична инваријантност је уведена Скотовим моделом и може се поставити питање: Да ли је овај модел најреалистичнији? Ако су пептидне групе распоређене по теменима правоуглог троугла онда цикличне инваријантности нема па се питање егзистенције антисиметричних солитона не поставља. Стога ће предмет даљих ауторових истраживања бити солитони у квантној жици са три нити која би била, у односу на Скотов, нови модел за алфа протеине. Ако би се испоставило да овај нови модел даје нискоенергетске солитоне резултат би свакако био од интереса за биоенергетику и биофизику уопште.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Н.М. Плакида (приватно саопштење), 1970.
- [2] В.М. Агранович, Теорија екситонов, Наука, Москва, 1968.
- [3] M. Pantić, Lj. Mašković and B.S. Tošić, Internat. J. Modern Phys. B, (1997) 789.
- [4] L.J. Budinski-Petković, U. Kozmidis-Luburić, M. Ćetković and B.S. Tošić (Послато у Phys. Rev. 1999.)
- [5] Б.С. Тошић, Статистичка физика, ПМФ, Нови Сад, 1978.
- [6] V.M. Agranovič, Zh. eksper.teor.Fiz. 37, (1959) 430.
- [7] V.M. Agranovič, B.S. Tošić, Zh. eksper. teor. Fiz. 53, (1967) 149.
- [8] С.В. Тјабличков, Методи квантној теорији магнетизма, Наука, Москва, 1965.
- [9] F. Jona and G. Shirane, Ferroelectric Crystals, Pergamon Press, Oxford, 1962.
- [10] В.Вакс, Уведеније в микроскопическују теорију сењатоелектриков, Наука, Москва, 1973.
- [11] R. Blinc, J. Phys. Chem. Solids 13, (1960) 204.
- [12] P.G. de Gennes, Sol. St. Commun. 1, (1963) 132.
- [13] M. Tokunaga and T. Matsubara, Progr. Theor. Phys. 35, (1966) 581.
- [14] R. Brout, K.A. Müller and H. Thomas, Sol. St. Commun. 4, (1966) 507.
- [15] R. Blinc and S. Svetina, Phys. Rev 147, (1966) 423,430.
- [16] Y.L.Wang and B.R. Cooper, Phys. Rev. 172, (1968) 539.
- [17] P. Pfeuty, Ann. Phys. 57, (1970) 79.
- [18] S.A. Pikin, V.M. Cukernik, JETF 50, (1966) 1377.
- [19] S.D. Drell, M. Weinstein and Sh. Yankielawicz, Phys. Rev. D 16, (1977) 1769.

- [20] R. Jullien, P. Pfeuty, J.N. Fields and S. Doniach, Phys. Rev. B 18, (1978) 3568.
- [21] D.A. Pink, Phys. Rev. Lett. 33, (1974) 897.
- [22] G. Um, Phys. Rev. B 15, (1977) 237 ibid 17, (1978) 3670.
- [23] Z. Friedman, Phys. Rev. Lett. 36, (1976) 1326.
- [24] Z. Friedman, Phys. Rev. B. 17, (1978) 1429.
- [25] A. Fernandez – Pacheco, Preprint SLAC PUB – 2099 (Stanford 1978), Preprint SLAC PUB – 2117 (Stanford 1978).
- [26] R.J. Elliot and C. Wood, J. Phys. C 4, (1971) 2359.
- [27] A. Yanase, Y. Takeshige and M. Suzuki, J. Phys. Soc. Japan, 41, (1976) 1108.
- [28] G. Kamieniarz, J. Phys. C 9, (1976) 4003.
- [29] V. Vaks, V.I. Zinenko, JETP 64, (1973) 650.
- [30] G. Kamieniarz, Phys. stat. sol. (b) 87, (1978) 455.
- [31] G. Kamieniarz, Acta Phys. Pol. A 52, (1977) 243.
- [32] P. Pfeuty, These de Doctorat, Paris, 1970.
- [33] M. Chabin and F. Gilleta, Ferroel. 15, (1977) 149.
- [34] P.S. Pearcy, Phys. Rev. B 9, (1974) 4868.
- [35] P.S. Peracy, Sol. St. Commun. 16, (1975) 439.
- [36] J. Holakovský, B. Brezina and O. Pacherová, Phys. Stat. Sol. (b) 53, K 69 (1972).
- [37] Д.В. Капор, Докторска дисертација, Нови Сад, 1979.
- [38] D.V. Kapor, B.S. Tošić, Phys. NHPC 103A, (1980) 609.
- [39] N.N. Bogoliubov, Lectures on Quantum Statistics (Volume I), Macdonald, London, 1968.
- [40] H.Fröhlich, Proc. Roy. Soc. A 215, (1952) 291.
- [41] J. Bardeen, L.N. Cooper and J. R. Schrieffer, Phys. Rev. 108, (1957) 1175.
- [42] O. Madelung, Introduction to Solid State Theory, New York, 1978.

- [43] N.W.Ashcroft, N.D. Mermin, Solid State Physics, Holt, Rinehart & Winston, New York, 1976.
- [44] W. A. Harrison, Solid State Theory, New York 1970.
- [45] J. M. Ziman, Principles of the Theory of Solids, Univ. Press, Cambridge, 1972.
- [46] J.P. Šetrajčić, R.P. Đajić, D.LJ. Mirjanić and B.S. Tošić, Phys. Scr. 42, (1990) 732.
- [47] B.S. Tošić, J.P. Šetrajčić, D.LJ. Mirjanić, Z.V. Bundalo, Physica A 184, (1992) 354.
- [48] R.P. Đajić, J.P. Šetrajčić, D.LJ. Mirjanić and B. S. Tošić, Int. J. Mod. Phys. B 1, (1987) 1001.
- [49] V.M. Burdeinii, FMM, 52, (1981) 1141.
- [50] C. Kittel, Introduction to Solid State Physics, Wiley & Sons, New York, 1971.
- [51] M. Pantić, LJ. M. Ristovski, LJ. P. Mašković and B.S. Tošić, Physica A, 227, (1996) 43.
- [52] D. Jerome, H. J. Schultz, Adv. Phys, 31, (1982) 299.
- [53] Yu. A. Firsov i dr, Polaroni, Nauka, Moskva, 1975.
- [54] А.С. Давидов, Солитони в молекуларних системах, Наукова думка, Київ, 1984.
- [55] L.N. Bulaevskii, UFN, 115, (1975) 263.
- [56] D.V. Kapor, S.D. Stojanović, M.J. Škrinjar and B.S. Tošić, Phys. Stat. Sol. (b) 74, (1976) 103.
- [57] J. Callaway, Quantum Theory of the Solid State, Academic Press, New York, 1974.
- [58] L. C. Feldman, J.W. Mayer, Fundamentals of Surface and Thin Film Analysis, North – Holland, New York–Amsterdam–London, 1986.
- [59] H.H. Chen, P.M. Levy, Phys. Rev. 7 (9), (1973) 4267.
- [60] K. Stachulec and A. Stachulec, Phys. Stat. Sol. (b) 92,K 117 (1979).
- [61] S. S. Kubakaddi and B.G. Mulimani, J. Phys. C Solid State Phys. 18, (1985) 6647.
- [62] T. Kodama and Y. Osaka, Japanese Journal of Applied Physics 25, (1986) 1875.
- [63] J. V. Brown and H. N. Spector, Physical Review B, 35, (1986) 3009.
- [64] K.B. Wong, M.Jaros and J. P. Hagon, Physical Review B, 35, (1987) 2463.

- [65] Hassan H. Hassan and Harold N. Spector, J. Vac. Sci. Technol. A 3 (1), (1985) 22.
- [66] T.P. Smith, III , H.Atemot, J. M. Hong, C. M. Knoedler, S.E. Laux and H. Schmid, Physical Review Letters, 59, (1987) 2802.
- [67] R.Perez – Alvarez, J.L. Parra – Santiago and P. Pajon – Suarez, Phys. Sts. Sol. (b) 147, (1988) 127.
- [68] C.R. Proetto, Physical Review B,45, (1992) 11911.
- [69] T. Yamauchi, Y. Acakawa and J. N. Schulman, Appl. Phys. Lett. 57 (12), (1999) 1224.
- [70] J. R. Heath and F. K. LeGoues, Chemical Physics Letters, 208, (1993) 263.
- [71] R. Chen and K. K. Bajaj, Physical Review B, 50, (1994) 1949.
- [72] J. Sanchez–Dehesa, J. A. Porto, F. Agullo–Rueda and F. Meseguer, J. Appl. Phys. 73 (10), (1993) 5027.
- [73] Craig S. Lent and P. Douglas Tougaw, J. Appl. Phys. 74 (10), (1993) 6227.
- [74] З. Иконић, В. Милановић, Полупроводничке квантне микроструктуре, Универзитет у Београду, 1997.
- [75] Д. Раковић, Физичке основе и карактеристике електротехничких материјала, Електротехнички факултет, Београд, 1995.
- [76] B.S. Tošić, J. P. Šetrajčić, R.P. Đajić–Jovanović and D. LJ. Mirjanić, Phys. Rev. B, 36, (1987) 9094.
- [77] M. G. Cottam and D. R. Tilley, Introduction to Surface and Superlattice Excitations, Univ. Press, Cambridge, 1989.
- [78] A.C. Scott, Phys. Rev. A 26, (1982) 578.
- [79] B. Tošić, LJ. Mašković, M. Škrinjar,D.Kapor and G. Knežević, J. Phys. 3, (1991) 7619.
- [80] S. I. Pekar, Zh. eksper. teor. Fiz. 33, (1957) 1022.
- [81] V. I. Sugakov, Fiz. tverd. Tela 5, (1963) 2207.
- [82] P.F. Kvencel and S.I. Pekar, Fiz. tverd. Tela 4, (1962) 2813.
- [83] B.S. Tošić, V.D. Sajfert, D.LJ. Mirjanić and J. P. Šetrajčić, J. Phys. Chem. Solids, 53, No 8, (1992) 1031.
- [84] V. Sajfert, B.S. Tošić, M.M. Marinković and U. F. Kozmidis–Luburić, Physica A 166, (1990) 430.

- [85] M. Ćetković, U.F. Kozmidis – Luburić, LJ. Mašković and B.S. Tošić, Microtheoretical Approach to Quantum Wires Problem (у штампи).
- [86] F.J. Dyson, Phys. Rev. 102, (1956) 1217; (1956)1230.
- [87] D. I. Lalović, B.S. Tošić, J. B. Vukajlija and R. B. Žakula, II Nuovo Cimento, 68 B, (1969) 75.
- [88] D.C. Mattis, The Theory of Magnetism I, Chapter 5, Springer–Verlag, Berlin, 1988.
- [89] З. Поповић, Приватно саопштење.
- [90] T. Ando, A. B. Fowler, F. Stern, Rev. Mod. Phys, 54, (1982) 437.
- [91] B.S. Tošić, J.P. Šetrajčić, R.P. Đajić and D.LJ. Mirjanić, Int. J. Mod. Phys. B1 (1988) 919.
- [92] M. Ćetković, U.F.Kozmidis–Luburić, LJ. Mašković and B.S. Tošić, Int. J. Mod. Phys. B (Примљено за штампу).
- [93] V. V. Batygin, I. N. Toptygin, Electrodynamical Problems, GIFML, Moskva, 1962.
- [94] G. Korn and T. Korn, Mathematical Handbook, Nauka, Moskva, 1970.
- [95] Dongzi Liu and S. Das Sarma, Localization in Semiconductor Quantum Wire Nanostructures, Internet, cond. matt. 9501113.
- [96] S. Das Sarma and D. W. Wang, Many–Body Renormalization of Semiconductor Quantum Wire Excitons: Apsorption Gain, Binding, Unbinding, and Mott Transition, Internet, cond. matt. 9905038.
- [97] A.O.Gogolin, Selected Topics in the Theory of 1D Quantum Wires, Internet, cond. matt. 9407103.
- [98] F. Göhmann, A. G. Izergin, V. E. Korepin, A.G. Pronko, Time and Temperature dependent correlation functions of the 1D impenetrable electron gas, Internet, cond. matt. 9805192.
- [99] Ben Yu–Kuang Hu and S.Das Sarma, Self–consistent calculation of ionised impurity scattering in semiconductor quantum wires, Internet, cond. matt. 9306014.
- [100] H.T. Johnson, L.B. Freund, C.D. Akyüz, and A. Zaslavsky, Finite element analysis of strain effects on electronic and transport properties in quantum dots and wires, Internet, cond. matt. 9806029.
- [101] Kevin Leung, Reinhold Egger and C. H. Mak, Dynamical simulation of transport in one–dimensional quantum wires, Internet, cond. matt. 9509078.

- [102] M.J.M. de Jong and L.W. Molenkamp, Hydrodynamic electron flow in high-mobility wires, Internet, cond. matt. 9411067.
- [103] Y. Wang, J. Voit, and Fu-Cho Pu, Exact Boundary Critical Exponents and Tunneling Effect in Integrable Models for Quantum Wires, Internet, cond. matt. 9602086.
- [104] A. Ramšak, and T. Rejec, Effect of deconfinement on resonant transport in quantum wires, Internet, cond. matt. 9803322.
- [105] Rosario Fazio, F.W. J. Hekking, and D. E. Khmelnitskii, Anomalous Thermal Transport in Quantum Wires, Internet, cond. matt. 9712269.
- [106] Guido Goldoni, Fausto Rossi, and Elisa Molinari, Excitonic effects in quantum wires, Internet, cond. matt. 9709291.
- [107] You-Quan Li, and Christian Gruber, The Hubbard quantum wire, Internet, cond. matt. 9709102.
- [108] Krzysztof Byczuk, Realistic Electron-Electron Interaction in a Quantum Wire, Internet, cond. matt. 9812380.
- [109] Gerhard Fasol and Hiroyuki Sakaki, Electron-Electron Scattering in Quantum Wires and it's Possible Suppression due to Spin Effects, Internet, cond. matt. 9306038.
- [110] Se Gi Yu, U. B. Pevzner, and K. W. Kim, Electrophonon resonance in cylindrical quantum wires, Physical Review B, Volume 58, Number 7, 15 August 1998—I.
- [111] K. Nikolić and A Mac Kinnon, Conductance and conductance fluctuations of narrow disordered quantum wires, Internet, cond. matt. 9405055.
- [112] Anton Yu. Alekseev, Vadim. V. Cheianov, Jürg Fröhlich, Comparing conductance quantization in quantum wires and Quantum Hall systems, Internet, cond. matt. 9607144.
- [113] Tobias Brandes, Arisato Kawabata, Conductance Increase by Electron-Phonon Interaction in Quantum Wires, Internet, cond. matt. 9604159.
- [114] J. Cserti, G. Szálka and G. Vattay, Conductance in a periodically doped quantum wire, Internet, cond. matt. 9710265.
- [115] Yu-Liang Liu, Conductance of a Finite Quantum Wire Connected to Reservoirs, Internet, cond. matt. 9706018.

**УНИВЕРЗИТЕТ У НОВОМ САДУ
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ
КЉУЧНА ДОКУМЕНТАЦИЈСКА ИНФОРМАЦИЈА**

Редни број:
РБР

Идентификациони број:
ИБР

Тип документације: Монографска документација
ТД

Тип записа: Текстуални штампани материјал
ТЗ

Врста рада: Докторска дисертација
ВР

Аутор: Милоје Ђетковић
АУ

Ментор: Проф. др Братислав Тошић
МН

Наслов рада: Квантне жице металних и диелектричних материјала
НР

Језик публикације: Српски, ћирилица
ЈП

Језик извода: Српски, енглески
ЛИ

Земља публиковања: Савезна Република Југославија
ЗП

Уже географско подручје: Србија, Нови Сад
УГП

Година: 1999.
ГО

Издавач: Ауторски репринт
ИЗ

Место и адреса: Институт за физику, Природно-математички факултет,
Нови Сад, Трг Доситеја Обрадовића 4
МА

Физички опис рада: Рад се састоји из 4 главе, 123 стране, 115 цитата
у библиографији, 5 слика.
ФО

Научна област: Физика
НО

Научна дисциплина: Физика кондензоване матерije
НД

Предметна одредница/Кључне речи: Квантне жице, фонони, електрони, квантне тачке
ПО

УДК:

Чува се: У библиотеци Института за физику и математику
ЧУ

Важна напомена:
ВН

Извод: Предмет проучавања ове дисертације су квантне жице металних и диелектричних материјала. Преласком на континуум нађена је једночестична таласна функција елементарних побуђења у квантној жици. Коефицијенти ове функције су комбинација равних таласа, у правцу где је одржана трансляциона инваријантност, и стојећих таласа у правцима где је она нарушена. Битно нов закључак у односу на досадашње анализе у континуалној апроксимацији је то да компоненте таласног вектора побуђења у квантној жици нису међусобно независне, што са стране одређују динамички параметри система. Показано је да се за електроне и спинске таласе квантна жица понаша као једнодимензиони ланац. Френкелови екситони негативне ефективне масе налазе се на цилиндру релативно великог радијуса чија је оса паралална са правцем у коме је одржана симетрија. Екситони са позитивном ефективном масом као и фероелектрична побуђења морају имати бар једну компоненту таласног вектора имагинарном, што значи да у квантној жици долази до њихове просторне локализације. У дисертацији су испитани фонони у квантним тачкама, тј. микрочиповима. Испитани су кубни и цилиндрични микрочипови. Констатовано је да су за побуђивање фонона у микрочиповима потребни топлотни кванди који одговарају температурама реда $150K$. Резултати до којих се дошло могу бити интересантни са аспекта високотемпературске суперпроводљивости.

ИЗ

Датум прихватања теме од стране НН већа: 18.02.1999.
ДП

Датум одбране:
ДО

Чланови комисије:
КО

Председник:
Члан: Проф. др Братислав Тошић, редовни професор ПМФ-а, Нови Сад, ментор
Члан:
Члан:
Члан:

UNIVERSITY OF NOVI SAD
FACULTY OF NATURAL SCIENCES & MATHEMATICS
KEY WORDS DOCUMENTATION

Accession number:

ANO

Identification number:

INO

Document type: Monographic type

DT

Type of record: Text printed material

TR

Contens code: Doctoral thesis

CC

Author: Miloje Ćetković

AU

Mentor: Prof. dr Bratislav Tošić

MN

Title: Quantum wires metalic and dielectrical materials

TI

Language of text: Serbian, Cyrillic

LT

Language of abstract: Serbian, English

LA

Country of publication: Federal Republic of Yugoslavia

CP

Locality of publication: Serbia, Novi Sad

LP

Publication year: 1999.

PY

Publisher: Author's reprint

PU

Publ. place: Institute of Physics, Faculty of Sciences, Novi Sad, Trg Dositeja Obradovića 4

PP

Physical description: Thesis is made by 4 chapters, 123 pages, 115 citations in literature,
5 pictures
PD

Scientific field: Physics
SF

Scientific discipline: Physics of condensed matter
SD

Subject/Key words: Quantum wires, phonons, electrons, quantum points
SKW

UC:

Holding data: The library in Institute of Physics and Mathematics, Novi Sad, Yugoslavia
HD

Note:
N

Abstract: Object of research this thesis are quantum wires metalic and dielectrical materials. Single-particle wave-functions of the elementary excitations in the quantum wire is derived in the continuum approximation. The coefficients of this function are the combination of travelling plane waves along the direction where the translational invariance is preserved and standing waves in the direction where it is broken. A substantially new conclusion whit respect to previous analyses in the continuum approximation is that the components of the wave-vector of the excitation in the quantum wire are not mutually independent, which is governed by the dynamical parameters of the system. It was shown that for electron and spin waves the quantum wire behaves as a one-dimensional chain. Frenkel excitons with negative effective mass are located on a cylinder of relatively large radius whose axis is parallel to the direction along which the symmetry is preserved. Exitons with positive effective mass and ferroelectric excitations must have at least one of the wave-vector components imaginary, meaning that in the quantum wire there occurs their spatial localization. Phonons in cubic and cylindric microchips are studied. It is found that the heat quants corresponding to temperatures of the order of 150 K are needed for the excitation of phonons in microchips. The obtained results could be interesting from the aspect of the hightemperature superconductivity.

AB

Accepted by the Scientific Board on: 18.02.1999.
ASB

Defended:
DE

Thesis defend board:
DB

President:
Member: Prof. dr Bratislav Tošić, Full Professor, Faculty of Sciences, Novi Sad, mentor
Member:
Member:
Member: