

D-313

25. 8. 94

0603 9/155

UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET
INSTITUT ZA FIZIKU

N e n a d V . D e l i ć

**TERMODINAMIKA FONONA
U DEFORMISANIM STRUKTURAMA**

- DIPLOMSKI RAD -

NOVI SAD, avgusta 1994.

*Život postavlja ciljeve nauci;
nauka osvetljuje put života.*
Nikolaj Mihajlovski

*Nauke se same dvojako uništavaju;
širinom u koju ulaze i dubinom u
koju uranjaju.*
Gete

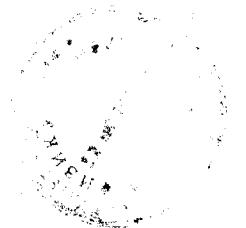
Koristim priliku da se zahvalim svojim roditeljima i bratu na strpljenju, svom mentoru dr J.P.Šetrajiću na svesrdnoj pomoći. Mr M. Pantiću sam zahvalan na korisnim sugestijama.

Posebnu zahvalnost dugujem našem "razrednom starešini" dr D.Kaporu na podršci tokom studija.

Zahvalan sam i svojim kolegama V. Zoriću i A. Utješanoviću na tehničkoj pomoći prilikom izrade ovog rada.

SADRŽAJ

	Strana
1. UVOD.....	4
2. FONONI U NEDEFORMISANIM STRUKTURAMA.....	5
3. FONONI U SPATEROVANIM FILMOVIMA.....	10
4. NISKOTEMPERATURSKE OSOBINE DEFORMISANIH FILMOVA	21
5. ZAKLJUČAK.....	27
6. LITERATURA.....	28



1. U V O D

Predmet ovog rada je ispitivanje fononskog sistema u deformisanim strukturama i njihovo poredjenje sa fononima u idealnim strukturama.

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

Oblast istraživanja u okviru ovog rada biće ograničena na analizu fonona odnosno fononskih stanja u tankim deformisanim strukturama (deformisanim filmovima). Filmovi predstavljaju beskonačne strukture u ravni sa dve paralelne granične površine duž pravca normalnog na tu ravan. Deformisana struktura nastaje zbog realnog postojanja granica sistema, defekata, primesa, načina spravljanja, sintetizovanja i dopingovanja (spaterovanja) struktura.

Posmatraćemo ograničene strukture sa nepravilnim rasporedom atoma duž zpravca i ispitati spektar, moguća stanja i termodinamičko ponašanje fononskog sistema. U glavi 2 je analizirano ponašanje fonona u nedeformisanim i beskonačnim strukturama. Glava 3 je posvećena analizi fononskih stanja i zakona disperzije u tankim filmovima sa narušenom simetrijom. U glavi 4 je ispitan uticaj fononskog spektra na termodinamičko ponašanje sistema i rezultati upoređeni sa odgovarajućim idealnim strukturama. U zaključku je dat rezime najvažnijih rezultata istraživanja i njihov kratak komentar. Na kraju je dat spisak korišćene literature.

2. FONONI U NEDEFORMISANIM STRUKTURAMA

U teorijskoj fizici čvrstog stanja najčešće se analiziraju idealne strukture koje su prostorno homogene i koje poseduju osobinu translacione invarijantnosti. Medjutim, poznato je da u praksi čistih izotropnih kristala nema. Svaka realna kristalna struktura poseduje izvestan procenat nečistoća (primesa, defekata, vakancija) kao i granične površine. Postojanje graničnih površina narušava translacionu simetriju kristala. Na stepen narušenja simetrije utiču takodje i nečistoće. Sva ova odstupanja od idealnih struktura kao rezultat daju specifične efekte koji su vrlo važni za praktičnu primenu. Mi ćemo posmatrati fononska stanja u strukturama sa narušenom simetrijom.

Zašto baš fononi? Fononi su osnovna pobudjenja u kristalima. Fononski podsystemi su uvek prisutni bez obzira da li se radi o elektronima, eksitonima ili nekom drugom tipu elementarnih eksitacija. Dakle, oni su glavni nosioci mehanizama koji "proizvode" određene fizičke osobine, pojave i efekte u kristalu. Oni se lako termalno pobudjuju i prisutni su već sa malim porastom temperature iznad 0 K. Značajno je dakle, prvo ispitati fonone.

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

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

Energija fonona je $E = \hbar\omega$, a impuls $\vec{p} = \hbar \vec{k}$. Pažljiva razmatranja pokazuju da postoji nekoliko tipova prostiranja talasnih poremećaja u kristalu. Oni se razlikuju po kretanju atoma unutar elementarne ćelije u kristalu. Svaki tip fonona je karakterisan specifičnom zavisnošću energije od kvaziimpulsa.

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

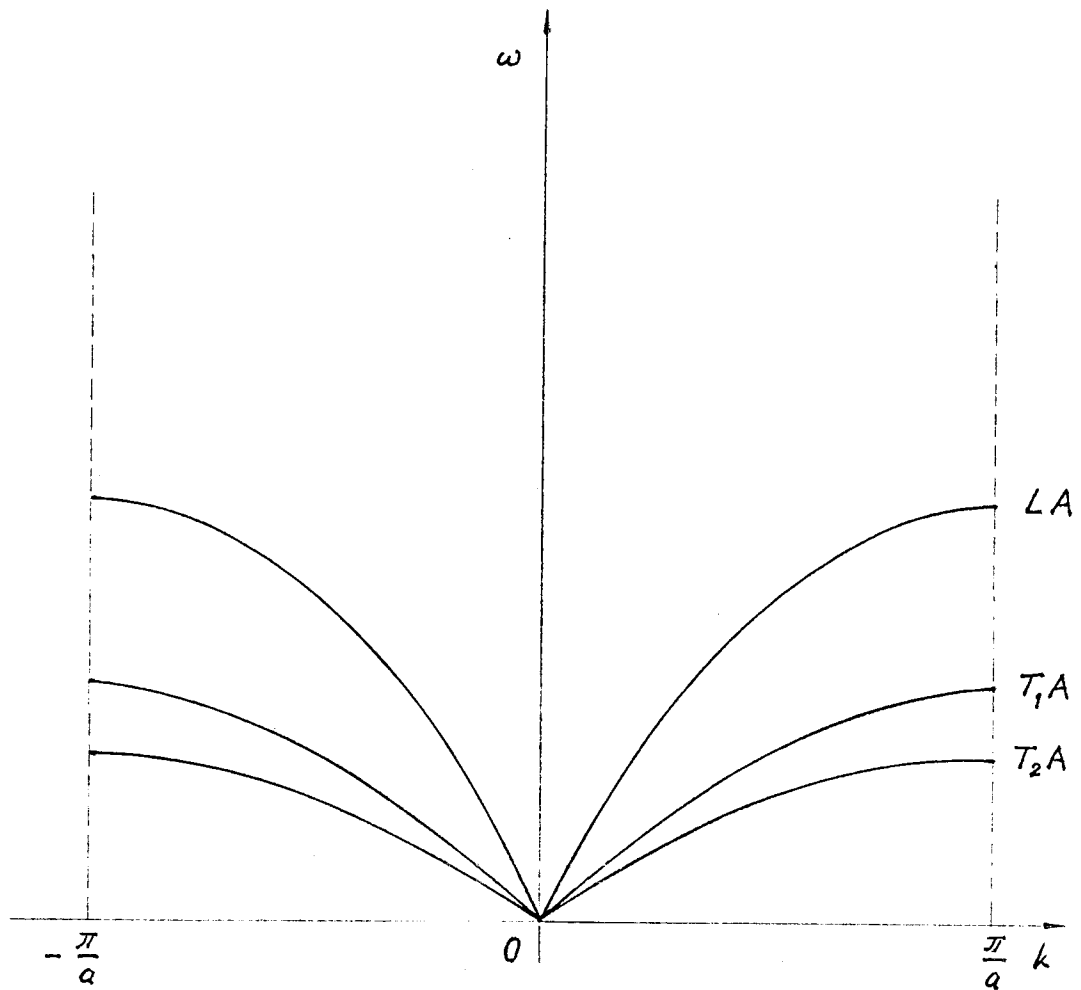
Na osnovu periodičnog rasporeda atoma, te periodičnosti recipričnog prostora, relevantna fizička karakteristika sistema (energija) je periodična funkcija talasnog vektora. Zbog medjusobne povezanosti, jedan atom trpi uticaj svih ostalih atoma koji ga okružuju, pa zbog kvantovanosti toga oscilovanja onda svaki kvant tog oscilovanja nosi pečat celokupnog kolektiva atoma, te se u kristalu ne može govoriti o fononima kao pobudjenjima individualnih atoma već o fononima koji predstavljaju kvante oscilovanja celog kristala.

Na osnovu gornjeg razmatranja važno je poznavati energetski spektar u čvrstom telu. Poznavanje zakona disperzije omogućuje da se odrede sve makroskopske karakteristike kristala (unutrašnja energija, specifična toplota). Naravno, energija kristala može imati bilo koju vrednost uzimajući u obzir postojanje velikog broja kvazičestica u kristalu.

Ovakvo definisanje fonona omogućuje da energija oscilatornog kretanja atoma u kristalu postane suma energija pojedinih fonona. Najpogodniji model za čvrsta tela je sud sastavljen od fononskog gasa. Na ovaj način se izdvajaju atomi od fonona, koji nisu ništa drugo nego talasni poremećaji iste forme. Zbog toga je izučavanje dinamičkih karakteristika kristala svedeno na izučavanje dinamike gasa fonona. Istina, ovo nije klasičan gas zato što broj čestica u sistemu nije sačuvan, on raste sa porastom temperature.

Fononi su bozoni, što sledi iz analize oscilatornog kretanja atoma. Dva sudarena fonona mogu nestati zajedno, a novi fonon nastaje sa energijom jednakom zbiru energija sudarenih fonona. Dakle, fononi su osnovna pobudjenja kristala i javljaju se, usled oscilatornog kretanja atoma oko ravnotežnih položaja, kao specifičan gas kvazičestica nelokalizovan za određeni atom iz kristala, već kao karakteristika celog kristala.

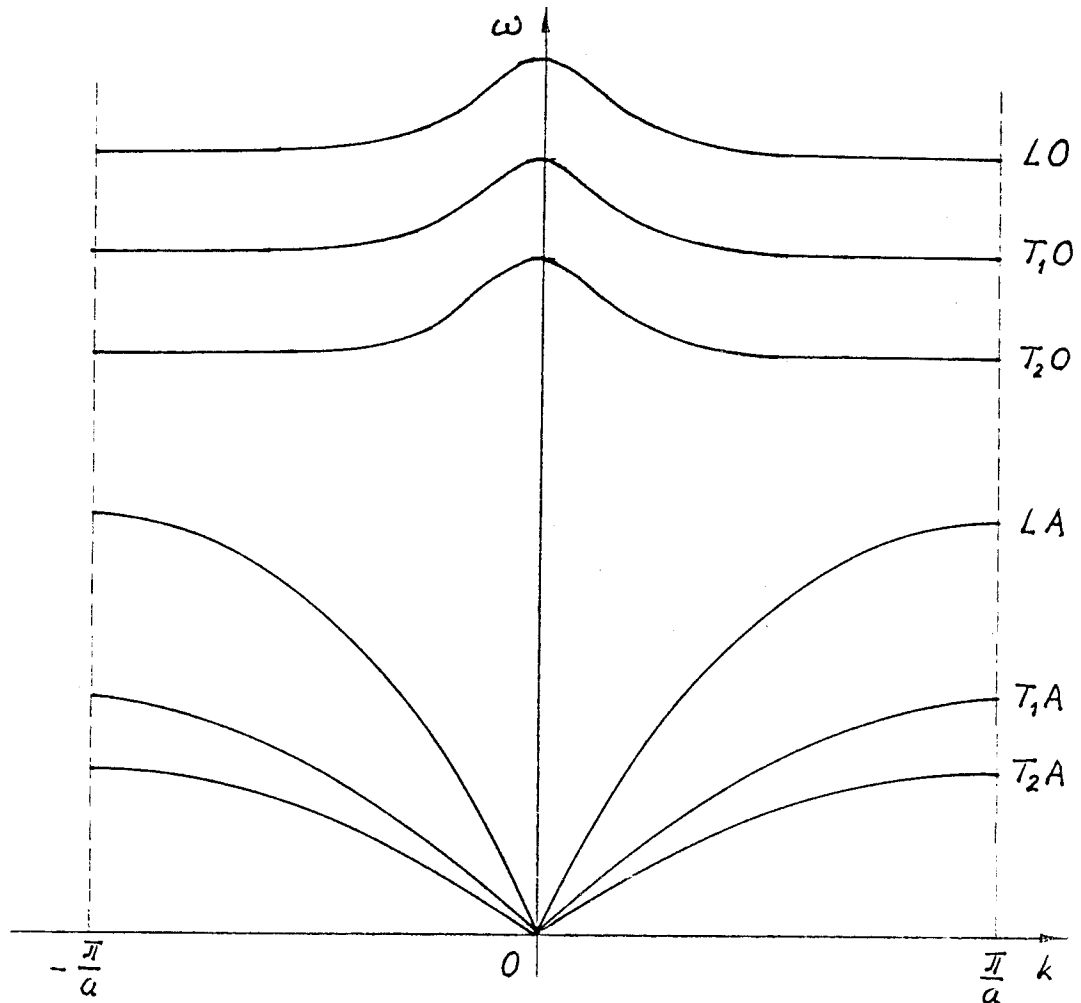
Za idealne beskonačne kristalne strukture sa prostom elementarnom ćelijom za-
visnost frekvencija ω od talasnog vektora \vec{k} , prikazana je na slici 2.1.



Slika 2.1

Vidi se da sve tri komponente zvučnih talasa $\omega_\alpha(\vec{k})$ teže nuli kad $k \rightarrow 0$. Takvi kvanti mehaničkih pobudjenja sa linearnim zakonom disperzije zovu se - **akustički fononi** .

Ako se analiziraju masivne kristalne strukture sa složenom elementarnom ćelijom, dobija se složenija zavisnost frekvencije $\omega(k)$, koja je predstavljena na slici 2.2.



Slika 2.2

Sa slike je uočljivo da tri frekvencije uvek teže nuli kad $k \rightarrow 0$ i one odgovaraju akustičkim fononskim granama, dok za ostale grane važi $\lim_{k \rightarrow 0} \omega(k) \neq 0$. Mehaničke oscilacije sa ovom osobinom se zovu - **optički fononi**. Na slici je predstavljen ukupan fononski spektar masivne kristalne strukture sa složenom elementarnom ćelijom, koji se sastoji od dve grane: niže akustičke i više optičke koja poseduje energetski gep. I akustički i optički fononi mogu biti longitudinalni (L) i transverzalni (T).

Eksperimentalni dokazi kvantovanja nekog elastičnog talasa uključuju sledeće:

1. Doprinos rešetke u toplotnom kapacitetu čvrstog tela uvek teži nuli kada temperatura teži nuli. Ovo jedino može biti objašnjeno kvantovanjem vibracija kristalne rešetke. To je jedan od dokaza postojanja fonona.

2. Detekcija fonona se može izvršiti X - zracima i neutronima koji se neelastično rasejavaju na kristalima. Ova rasejanja se odvijaju sa promenama energije i impulsa koje odgovaraju stvaranju ili apsorbovanju jednog ili više fonona. Merenjem "uzmaka" rasejanih X - zraka ili neutrona, određuju se svojstva pojedinih fonona. Takvi eksperimenti pružaju najbolji način za određivanje disperzionih relacija za fonone, tj. daju zavisnost frekvencije od talasnog vektora i predstavljaju najbolji dokaz postojanja fonona.

Iz ovog razmatranja se može pretpostaviti da u slučaju masivne kristalne strukture sa jednim atomom po elementarnoj ćeliji, kristal "ne oseća" pojedinačne atome već oni svi osciluju kao elementarna ćelija i javljaju se samo akustički fononi.

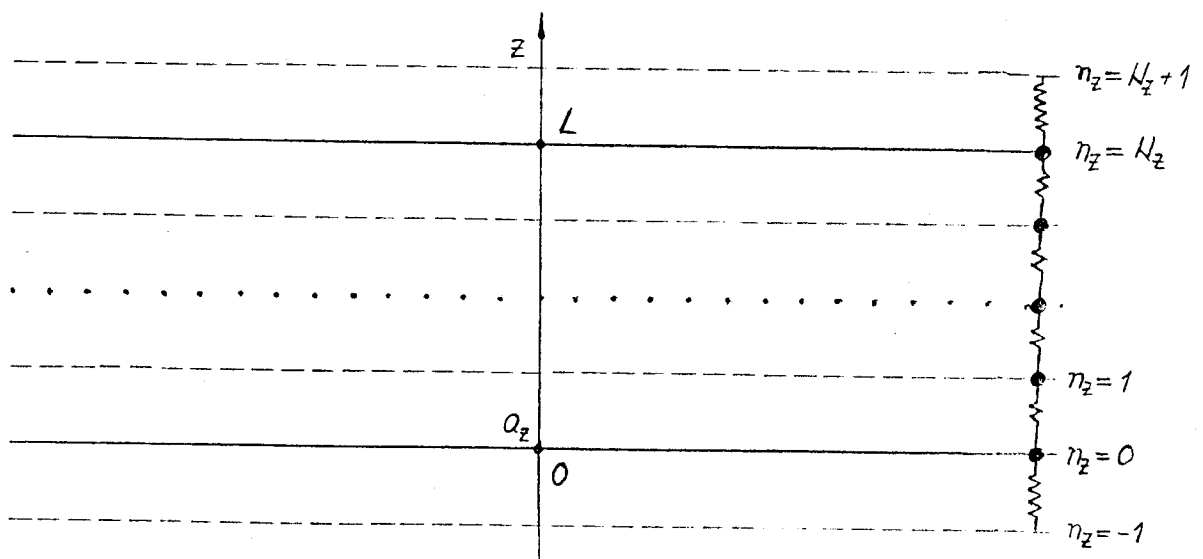
Kada su u pitanju masivne kristalne strukture sa složenom elementarnom ćelijom, tj. dva ili više atoma po elementarnoj ćeliji, vidi se da se javljaju pored akustičkih i optički fononi. Ovo bi značilo, da pored oscilovanja elementarne ćelije kristala postoji i oscilovanje atoma oko centra masa koje se javlja na nekoj minimalnoj frekvenciji (različitoj od nule) i ovo oscilovanje objašnjava pojavu optičkih fonona.

3. FONONI U SPATEROVANIM FILMOVIMA

Priroda idealnih kristalnih struktura ne omogućava konstrukciju visokotemperaturnih superprovodnika. Činjenice do kojih se došlo eksperimentalnim proučavanjem keramika, koje su spaterovane sitnozrnastim oksidima ukazuju da se fenomen superprovodnosti može realizovati u neidealnim strukturama. Analizom tankih idealnih (nederformisanih) filmova, došlo se do zaključka da se u ovakvim strukturama mogu postići neophodni uslovi za visokotemperaturnu superprovodnost. Kako atomske mase takodje definišu fononske spektre došlo se na ideju da fononski spektri mogu biti izmenjeni adekvatnom distribucijom masa duž jednog pravca. Ove pretpostavke čine osnovu teorijskog modela deformisanih filmova. Deformacija se može postići pogodnim delovanjem spoljašnjeg pritiska na paralelne granične površine i drugim spoljašnjim poljem.

Posmatra se tanki film koji je u XY - ravnima beskonačan, a u z - pravcu ima konačnu debljinu. Dopingovanjem (spaterovanjem) tankog filma primesnim atomima duž z - pravca sa jedne granične površine dobija se film sa narušenom translacionom simetrijom. Pretpostavlja se da je u nedopingovanoj matrici duž z -ose locirano N_z atoma i da su torzione konstante $C_{\alpha\beta}$; ($\alpha \neq \beta$) zanemarljive u odnosu na konstante istezanja $C_{\alpha\alpha}$.

Parametri elementarne ćelije nedopingovanog filma su: $a_x \approx a_y = a$ i $a_z \approx 3a$ (slika 3.1).



Slika 3.1

Hamiltonijan fononskog sistema u aproksimaciji najbližih suseda ima standardan oblik:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \vec{n}} \frac{(p_{\vec{n}}^{\alpha})^2}{M_{\vec{n}}} + \frac{1}{4} \sum_{\alpha, \vec{n}, \vec{\lambda}} C_{\vec{n}}^{\alpha\alpha} (u_{\vec{n}}^{\alpha} - u_{\vec{n}-\vec{\lambda}}^{\alpha})^2. \quad (3.1)$$

Ubačeni atomi obrazuju "grozd", tj. gomilaju se sa gornje strane granične površine u z - pravcu, a prema donjoj graničnoj površini njihov broj opada. Pretpostavimo da je masa ubačenih atoma veća od mase atoma osnovne matrice. Pri analizi posmatranog sistema svi važni fizički parametri filma (masa, konstante istežanja, atomski pomeraji, impulsi) postaju zavisni od rešetkinog indeksa $n_z = 0, 1, 2, \dots, N_z$, tj.:

$$M_{\vec{n}} \equiv M_{n_x, n_y, n_z} = M_{n_z}.$$

Isto važi i za konstante istežanja:

$$C_{\vec{n}}^{\alpha\alpha} \equiv C_{\alpha\alpha, n_x, n_y, n_z} = C_{\alpha\alpha, n_z}.$$

Ako se posmatra n -ti atom i njegovi najbliži susedi, hamiltonijan (3.1) dobija oblik:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \vec{n}} \frac{(p_{\vec{n}}^{\alpha})^2}{M_{n_z}} + \frac{1}{4} \sum_{\alpha, \vec{n}} C_{\alpha\alpha, n_z} [(u_{\vec{n}}^{\alpha} - u_{\vec{n}-1}^{\alpha})^2 + (u_{\vec{n}}^{\alpha} - u_{\vec{n}+1}^{\alpha})^2].$$

S obzirom na opisani model (postojanje dveju graničnih površina), ovaj hamiltonijan se može napisati kao zbir površinskog H_P i zapreminskog H_Z dela:

$$H = H_P + H_Z, \quad (3.2)$$

H_P opisuje energetski doprinos površina, a H_Z unutrašnjih slojeva filma. Atomi koji pripadaju graničnim površinama, tj. slojevima $n_z = 0$ i $n_z = N_z$ nisu "zamrznuti" u z - pravcu. Zbog odsustva slojeva $n_z = -1$ i $n_z = N_z + 1$, odgovarajući fononski pomeraji biće jednaki nuli, tj:

$$u_{\alpha, n_x, n_y, -1} = u_{\alpha, n_x, n_y, N_z+1} = 0,$$

a sa druge strane pripadne konstante elastičnosti su:

$$C_{\alpha\alpha, -1} = C_{\alpha\alpha, N_z+1} \neq 0,$$

tako da granične površine ne predstavljaju "krute zidove" već površine koje "dišu". Eksplicitni izrazi za hamiltonijane H_P i H_Z imaju oblik:

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

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

Koristeći Hajzenbergove jednačine za u i p :

$$i\hbar \dot{u}_{\vec{m}}^\beta = [u_{\vec{m}}^\beta, H]; \quad i\hbar \dot{p}_{\vec{m}}^\beta = [p_{\vec{m}}^\beta, H]; \quad \vec{m} \equiv (m_x, m_y, m_z)$$

i uzimajući u obzir komutacione relacije za operatore pomeraja u i impulsa p :

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

dobija se sistem od $N_z + 1$ diferencijalno-diferencne jednačine za fononske pomeraje:

1) $n_z = 0$:

$$\begin{aligned} \ddot{u}_{\beta, m_x, m_y, 0} = & \frac{C_{\beta\beta, 0}}{M_0} \left(u_{\beta, m_x+1, m_y, 0} + u_{\beta, m_x-1, m_y, 0} - 5u_{\beta, m_x, m_y, 0} + \right. \\ & \left. + u_{\beta, m_x, m_y+1, 0} + u_{\beta, m_x, m_y-1, 0} + u_{\beta, m_x, m_y, 1} \right) + \\ & + \frac{C_{\beta\beta, 1}}{2M_0} \left(u_{\beta, m_x, m_y, 1} - u_{\beta, m_x, m_y, 0} \right) - \frac{C_{\beta\beta, -1}}{2M_0} u_{\beta, m_x, m_y, 0}, \end{aligned} \quad (3.3)$$

2) $1 \leq n_z \leq N_z - 1$:

$$\begin{aligned} \ddot{u}_{\beta, m_x, m_y, m_z} = & \frac{C_{\beta\beta, m_z}}{M_{m_z}} \left(u_{\beta, m_x+1, m_y, m_z} + u_{\beta, m_x-1, m_y, m_z} - 2u_{\beta, m_x, m_y, m_z} + \right. \\ & \left. + u_{\beta, m_x, m_y+1, m_z} + u_{\beta, m_x, m_y-1, m_z} - 2u_{\beta, m_x, m_y, m_z} \right) + \\ & + \frac{C_{\beta\beta, m_z}}{2M_{m_z}} \left(u_{\beta, m_x, m_y, m_z+1} + u_{\beta, m_x, m_y, m_z-1} - 2u_{\beta, m_x, m_y, m_z} \right) + \\ & + \frac{C_{\beta\beta, m_z+1}}{2M_{m_z}} \left(u_{\beta, m_x, m_y, m_z+1} - u_{\beta, m_x, m_y, m_z} \right) + \\ & + \frac{C_{\beta\beta, m_z-1}}{2M_{m_z}} \left(u_{\beta, m_x, m_y, m_z-1} - u_{\beta, m_x, m_y, m_z} \right), \end{aligned} \quad (3.4)$$

3) $n_z = N_z$:

$$\begin{aligned} \ddot{u}_{\beta, m_x, m_y, N_z} = & \frac{C_{\beta\beta, N_z}}{M_{N_z}} \left(u_{\beta, m_x+1, m_y, N_z} + u_{\beta, m_x-1, m_y, N_z} - 5u_{\beta, m_x, m_y, N_z} + \right. \\ & \left. + u_{\beta, m_x, m_y+1, N_z} + u_{\beta, m_x, m_y-1, N_z} + u_{\beta, m_x, m_y, N_z-1} \right) + \\ & + \frac{C_{\beta\beta, N_z-1}}{2M_{N_z}} \left(u_{\beta, m_x, m_y, N_z-1} - u_{\beta, m_x, m_y, N_z} \right) - \frac{C_{\beta\beta,}}{2M_{N_z}} u_{\beta, m_x, m_y, N_z}. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Rešenje sistema jednačina (3.3), (3.4) i (3.5) može da se potraži u obliku proizvoda nepoznate funkcije u z -pravcu i ravnih harmonijskih talasa u XY -ravnima, jer je translaciona invarijantnost narušena samo duž z -pravaca :

$$u_{\beta, m_x, m_y, m_z} = \sum_{k_x, k_y} \left[\Phi_{\beta, m_z} e^{ia(k_x m_x + k_y m_y) - i\omega t} + h.c. \right]. \quad (3.6)$$

Nalaženjem odgovarajućih izvoda i njihovim ubacivanjem u jednačinu (3.4) dobija se sistem diferencnih jednačina za amplitude Φ_{α, n_z} :

$$\begin{aligned} \Phi_{\alpha, n_z} \left\{ \frac{4C_{\alpha\alpha, n_z}}{M_{n_z}} \left[\sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y}{2} \right] - \omega^2 \right\} = \\ = \frac{C_{\alpha\alpha, n_z}}{2M_{n_z}} (\Phi_{\alpha, n_z+1} + \Phi_{\alpha, n_z-1} - 2\Phi_{\alpha, n_z}) + \\ + \frac{C_{\alpha\alpha, n_z+1}}{2M_{n_z}} (\Phi_{\alpha, n_z+1} - \Phi_{\alpha, n_z}) + \frac{C_{\alpha\alpha, n_z-1}}{2M_{n_z}} (\Phi_{\alpha, n_z-1} - \Phi_{\alpha, n_z}), \end{aligned} \quad (3.7)$$

koja važi za $n_z = 1, 2, 3, \dots, N_z - 1$.

Za $n_z = 0$, na isti način dobija se prva (gornja) granična jednačina:

$$\begin{aligned} 2\Phi_{\alpha, 0} \left\{ \omega^2 M_0 - 4C_{\alpha\alpha, 0} \left[\sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y}{2} \right] \right\} + C_{\alpha\alpha, 0} (\Phi_{\alpha, 1} - 2\Phi_{\alpha, 0}) + \\ + C_{\alpha\alpha, 1} (\Phi_{\alpha, 1} - \Phi_{\alpha, 0}) - C_{\alpha\alpha, -1} \Phi_{\alpha, 0} = 0, \end{aligned} \quad (3.8)$$

a za $n_z = N_z$ druga (donja) granična jednačina:

$$\begin{aligned} 2\Phi_{\alpha, N_z} \left\{ \omega^2 M_{N_z} - 4C_{\alpha\alpha, N_z} \left[\sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y}{2} \right] \right\} + C_{\alpha\alpha, N_z} (\Phi_{\alpha, N_z-1} - 2\Phi_{\alpha, N_z}) + \\ + C_{\alpha\alpha, N_z-1} (\Phi_{\alpha, N_z-1} - \Phi_{\alpha, N_z}) - C_{\alpha\alpha, N_z+1} \Phi_{\alpha, N_z} = 0. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Postupak određivanja mogućih fononskih stanja na osnovu gornjih jednačina je vrlo složen. Iz tog razloga se vrši prelaz na kontinuum (tzv. kontinualna aproksimacija), koja se sastoji u razvoju odgovarajućih veličina u Tajlorov red. Pri tom veličine:

$$n_z \longrightarrow z; \quad \Phi_{\alpha, n_z} \longrightarrow \Phi_{\alpha}(z); \quad M_{n_z} \longrightarrow M(z); \quad C_{\alpha\alpha, n_z} \longrightarrow C_{\alpha}(z),$$

zavise od kontinualne promenljive z , pri čemu $k \rightarrow 0$ (dugotalasna aproksimacija). Nakon zamene diskretnih veličina kontinualnim i ubacivanjem u diferencnu jednačinu (3.7), ona prelazi u diferencijalnu jednačinu drugog reda:

$$\frac{d^2 \Phi_{\alpha}(z)}{dz^2} + \frac{1}{C_{\alpha}(z)} \frac{dC_{\alpha}(z)}{dz} \frac{d\Phi_{\alpha}(z)}{dz} - \left[\frac{a^2 k^2}{a_z^2} - \frac{M(z)}{C_{\alpha}(z) a_z^2} \omega^2 \right] \Phi_{\alpha}(z) = 0. \quad (3.10)$$

Sada je potrebno zadati zakon distribucije masa $M(z)$, duž z - pravca. Masa osnovne matrice (zbog spaterovanja, tj. nagomilavanja stranih atoma oko atoma osnovne matrice) mora biti zamenjena **efektivnom** masom, pa možemo pisati:

$$\frac{1}{M} = \frac{1}{\mu_m} - \frac{n}{\mu_s},$$

μ_m - masa osnovne matrice

μ_s - masa spaterovanih atoma

n - broj spaterovanih atoma između granične ravni i prvog sledećeg atomskog sloja.

Spaterovanjem stranih atoma u osnovnu matricu duž z - pravca, zbog toga što je to njima energetski povoljnije, se uspostavlja parabolična distribucija redukovane mase (parabolička deformacija), što je dato izrazom:

$$M(z) = A + B(z - L)^2. \quad (3.11)$$

gde su A i B - konstante koje treba odrediti iz graničnih uslova. Redukovana masa je najmanja na gornjoj graničnoj površini ($z = L$), dok je na donjoj graničnoj površini ($z = 0$) jednaka masi osnovne matrice μ_m (što znači da spaterovani atomi ne dopiru do donje površine). Tada funkcija $M(z)$ mora zadovoljavati sledeće uslove:

$$M(0) = \mu_m ; \quad M(L) = \frac{\mu_m \mu_s}{\mu_s - n \mu_m}.$$

Odredjivanjem konstanti A i B korišćenjem graničnih uslova, dobija se sledeći izraz za distribuciju masa:

$$M(z) = \frac{\mu_m}{\rho_M} \left[1 - (1 - \rho_M) \left(1 - \frac{z}{L} \right)^2 \right], \quad (3.12)$$

gde je:

$$\rho_M = 1 - \frac{n \mu_m}{\mu_s}.$$

Usled nagomilavanja ubačenih atoma duž z - pravca, konstanta rešetke a_z se takodje parabolički deformiše na sledeći način:

$$a(z) = D + F(z - L)^2.$$

Granični uslovi koje ova funkcija zadovoljava su:

$$a(0) = a_z ; \quad a(L) = \frac{a_z}{n} ,$$

a_z - medjuatomska rastojanja duž z - pravca za nespaterovanu matricu.

Iz graničnih uslova određuju se konstante D i F tako da za konstantu rešetke duž z - pravca dobijamo sledeći izraz:

$$a(z) = a_z \left[1 - \frac{n-1}{n} \frac{z}{L} \left(2 - \frac{z}{L} \right) \right] .$$

Kako potencijal opada sa porastom rastojanja izmedju atoma, to je veza izmedju konstante elastičnosti $C_\alpha(z)$ matrice u z - pravcu i medjuatomske rastojanja $a(z)$ data na sledeći način:

$$C_\alpha(z) = \frac{const}{a^p(z)} ,$$

gde p - označava stepen sa kojim medjuatomske potencijali opadaju sa rastojanjem. Uvrštavajući $a(z)$ dobija se:

$$C_\alpha(z) = C_z \left[1 - \frac{n-1}{n} \frac{z}{L} \left(2 - \frac{z}{L} \right) \right]^{-p} ,$$

C_z - konstanta istežanja za nespaterovanu matricu duž z - pravca.

Razvojem gornjeg izraza u red dobija se:

$$\left[1 - \frac{n-1}{n} \frac{z}{L} \left(2 - \frac{z}{L} \right) \right]^{-p} \approx 1 + p \frac{n-1}{n} \frac{z}{L} \left(2 - \frac{z}{L} \right) ,$$

odatle sledi:

$$C_\alpha(z) = C_z \left[1 + p \frac{n-1}{n} \frac{z}{L} \left(2 - \frac{z}{L} \right) \right] .$$

U daljoj analizi, umesto $a(z)$ i $C_\alpha(z)$ biće korišćene njihove usrednjene vrednosti po debljini L filma:

$$\bar{a} \equiv \bar{a}(z) = \frac{1}{L} \int_0^L a(z) dz ,$$

$$\bar{C} \equiv \bar{C}_\alpha(z) = \frac{1}{L} \int_0^L C(z) dz .$$

Nakon usrednjavanja dobijaju se sledeći izrazi:

$$\bar{a} = a_z \frac{n+2}{3n} , \tag{3.13}$$

$$\bar{C} = C_z \left(1 + 2p \frac{n-1}{3n} \right) . \tag{3.14}$$

U daljoj analizi u jednačini (3.10) se zamenjuju gornje srednje vrednosti:

$$a(z) \longrightarrow \bar{a} ; \quad C_\alpha(z) \longrightarrow \bar{C} .$$

Da bi se jednačina (3.10) mogla rešiti uvodi se smena:

$$1 - \frac{z}{L} = \lambda \xi ,$$

i vrši prelaz na novu promenljivu ξ , tj. :

$$\frac{d}{dz} = -\frac{1}{L\lambda} \frac{d}{d\xi} ; \quad \frac{d^2}{dz^2} = \frac{1}{(L\lambda)^2} \frac{d^2}{d\xi^2} . \quad (3.15)$$

Zamenom izraza (3.12), (3.13) i (3.14) u izraz (3.10) diferencijalna jednačina postaje:

$$\frac{d^2\Phi}{d\xi^2} + \left[\frac{(L\lambda\omega)^2}{\bar{a}^2 \bar{C}} \frac{\mu_m}{\rho_M} - \frac{(\lambda^2 L\omega)^2}{\bar{a}^2 \bar{C}} \frac{\mu_m (1 - \rho_M)}{\rho_M} \xi^2 - \left(\frac{L a k \lambda}{\bar{a}} \right)^2 \right] \Phi = 0 ,$$

pri čemu se uzima da je:

$$\frac{(\lambda^2 L\omega)^2}{\bar{a}^2 \bar{C}} \frac{\mu_m (1 - \rho_M)}{\rho_M} = 1 .$$

Iz toga se dobija:

$$\lambda = \sqrt{\frac{\bar{a}}{L\omega}} \Omega ; \quad \Omega = \sqrt{\frac{\bar{C}}{\mu_m} \frac{\rho_M}{1 - \rho_M}} .$$

Nakon izvršenih transformacija gornja diferencijalna jednačina dobija poznat oblik (Ermit-Weberova diferencijalna jednačina):

$$\frac{d^2\Phi}{d\xi^2} + [Q(\omega) - \xi^2] \Phi = 0 , \quad (3.16)$$

gde je:

$$Q(\omega) = \frac{L}{\bar{a}} \left[\frac{\omega}{\Omega(1 - \rho_M)} - \frac{\Omega q^2}{\omega} \right] ; \quad q = a k ; \quad k^2 = k_x^2 + k_y^2 .$$

Rešenje Ermit - Weberove jednačine je oblika:

$$\Phi_s^a(\xi) = A_s H_s(\xi) e^{-1/2 \xi^2} , \quad (3.17)$$

pri čemu je $H_s(\xi)$ - Hermitov polinom reda s .

Da bi ovi pomeraji bili konačni, potrebno je da $Q(\omega)$ zadovoljava sledeći uslov:

$$Q(\omega) = 2s + 1 ; \quad s = 0, 1, 2, \dots$$

Ovaj uslov obezbedjuje fizičku stabilnost film - strukture proizvoljne debljine, što dovodi do sledećeg izraza za oscilatorne frekvencije sistema:

$$\omega_s(q) = \frac{\Omega \bar{a}}{2L} (2s + 1) (1 - \rho_M) \left[1 + \sqrt{1 + \left(\frac{2q}{2s + 1} \right)^2 \left(\frac{L}{\bar{a}} \right)^2 \frac{1}{1 - \rho_M}} \right]. \quad (3.18)$$

Dakle, dobijen je izraz za oscilatorne frekvencije sistema iz kojeg se vidi da nijedna od frekvencija $\omega_s(q)$ ne teži nuli kad dvodimenzioni vektor $q \rightarrow 0$.

S obzirom na prisustvo granica Ermit - Veberova jednačina (3.16) mora biti dopunjena dvema graničnim jednačinama (3.8) i (3.9), za $z = 0$ i $z = L$. Zamenom rešenja (3.17) u (3.8) za $z = 0$ i $q = 0$ dobija se:

$$H_s \left(\frac{1}{\lambda} \right) \left[2 - \frac{\rho_M \omega_s^2}{\Omega^2} \right] = H_s \left[\frac{1}{\lambda} \left(1 - \frac{\bar{a}}{L} \right) \right] e^{\frac{\omega_s}{2\bar{n}} \left(2 - \frac{\bar{a}}{L} \right)}. \quad (3.19)$$

Analognim postupkom granična jednačina za $z = L$ postaje:

$$H_s(0) \left[2 - \frac{\omega_s^2}{\Omega^2} (\rho_M - 1) \right] = H_s \left(\frac{\bar{a}}{L\lambda} \right) e^{-\frac{\omega_s}{2\bar{n}} \frac{\bar{a}}{L}}. \quad (3.20)$$

Korišćenjem relacije $H_s(x + c) = H_s(x) + (2c)^s$ može se napisati:

$$H_s \left[\frac{1}{\lambda} \left(1 - \frac{\bar{a}}{\lambda} \right) \right] = (-1)^s H_s \left(\frac{\bar{a}}{\lambda L} \right) + \left(\frac{2}{\lambda} \right)^s,$$

jednačine (3.19) i (3.20) se svode na jednačinu:

$$H_s \left(\frac{1}{\lambda} \right) \left(2 - \frac{\rho_M \omega_s^2}{\Omega^2} \right) - \left(\frac{2}{\lambda} \right)^s e^{\frac{\omega_s}{2\bar{n}} \left(2 - \frac{\bar{a}}{L} \right)} = (-1)^s H_s \left(\frac{\bar{a}}{\lambda L} \right) e^{\frac{\omega_s}{2\bar{n}} \left(2 - \frac{\bar{a}}{L} \right)}.$$

Nakon sredjivanja ova jednačina konačno dobija oblik:

$$\left(2 - \frac{\rho_M \omega_s^2}{\Omega^2} \right) \left[H_s \left(\frac{1}{\lambda} \right) - (-1)^s H_s(0) e^{\frac{\omega_s}{\bar{n}}} \right] = \left[\frac{\omega_s^2}{\Omega^2} H_s(0) (-1)^s + \left(\frac{1}{\lambda} \right)^s e^{-\frac{\omega_s \bar{a}}{2\bar{n}L}} \right] e^{\frac{\omega_s}{\bar{n}}}.$$

Oдавde se vidi da parametri μ_m , μ_s , n , L i kvantni broj s nisu medjusobno nezavisni. Oni u suštini, za date vrednosti, definišu uslove egzistencije fononskih stanja sa energijama $\omega_s(q)$ (3.18).

Iz poslednje jednačine može se odrediti za koju vrednost kvantnog broja s funkcija $\omega_s(0)$ ima minimalnu vrednost. Grafičko - numeričkim rešavanjem se dobija rešenje za $s_{min} = 2$. Pri tom se u ovu jednačinu uvrštavaju minimalne vrednosti funkcija.

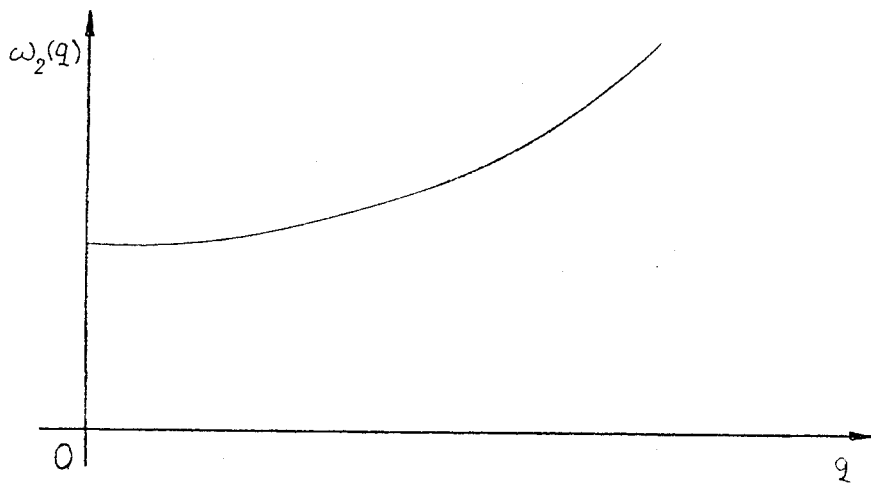
$$\Omega_{min} = \sqrt{\frac{\rho_M}{1 - \rho_M}} G \frac{v_0}{a_0} 10^{12} ; \quad \lambda_{min} = \sqrt{\frac{\bar{a}}{L}} \frac{\Omega_{min}}{\omega_s(0)},$$

gde su:

$$G = 1 + 2p \frac{n-1}{3n} ; \quad \sqrt{\frac{C}{\mu_m}} = 10^{12} \frac{v_0}{a_0}.$$

Numeričke kalkulacije su vršene za jedinjenje $La(Ba_{2-x}La_x)Cu_3O_{7+\delta}$, pri čemu je uzeto $N_z = 3$, $n = 3$, $p = 12$, $\rho_m = 1/0.83$, $x = 0.125$, $\delta = 0.11$, $v_0 = 3$, $a_0 = 1.2$.

Grafički prikaz zakona disperzije $\omega_2(q)$ za konkretne vrednosti pomenute strukture dat je na slici (3.2):



Slika 3.2

Sa grafika se vidi da ni jednu od frekvencija ω_2 ne teži nuli kad $k \rightarrow 0$ (odnosno $q \rightarrow 0$), što znači da masena deformacija paraboličkog tipa (3.12) dovodi do pojave fonona optičkog tipa.

Numerička vrednost širine gepa, očitana sa grafika je:

$$\omega_2^{min} = 1.875 \cdot 10^{12} \frac{v_0}{a_0}.$$

Na osnovu toga aktivaciona temperatura se računa pomoću izraza:

$$T_{ac} = \frac{\hbar \omega_2^{min}}{k_B},$$

i u ovom slučaju iznosi $T_{ac} \approx 35 K$.

Ispitujući i upoređujući fononske spektre i stanja u idealnim i film - strukturama može se zaključiti sledeće.

1. Mehaničke vibracije u idealnim beskonačnim strukturama su ravni talasi u svim pravcima, dok u tankim filmovima predstavljaju spoj stojećih talasa u z - pravcu i ravnih talasa u XY ravnima.

2. Amplituda fononskih pomeraja u filmovima zavisi od debljine filma i $\sim 10^4 \sqrt{2/N_z}$ puta je veća nego u idealnim strukturama. To znači da se tu ima veći elastični "manevarski prostor", bez kidanja medjuatomskih veza, što vodi većoj mehaničkoj otpornosti i višoj tački topljenja kod filmova u odnosu na masivne uzorke.

3. Sve tri akustičke frekvencije u masivnim strukturama teže nuli kada $k \rightarrow 0$, dok se u tankom filmu javljaju fononi optičkog tipa. To znači da fononi u tankim strukturama poseduju energetski gep, odnosno za njihovo pobudjivanje (kreiranje) potrebno je uložiti energiju ili zagrevati do određene aktivacione temperature T_{ac} , što znači da se sistem do T_{ac} ponaša kao "zamrznut", tj. fononi nisu prisutni.

4. Iz dobijenog fononskog zakona disperzije vidi se da ni jedna od frekvencija ne teži nuli kada talasni vektor teži nuli, tj. masena deformacija i postojanje graničnih površina uslovljavaju pojavu fonona optičkog tipa. Ovo se objašnjava u slučaju tankog filma na taj način što zbog postojanja granica sistema elementarne ćelije kristala ne mogu kolektivno da osciluju, (tj. granice sistema predstavljaju "krute zidove") do neke određene temperature T_{ac} . Nakon T_{ac} elementarne ćelije počinju kolektivno da osciluju (više ne predstavljaju "krute zidove" već površine koje "dišu") i javljaju se fononi optičkog tipa.

5. Dopingovanjem se postiže viša aktivaciona temperatura u odnosu na nedeformisane (idealne) filmove. Ova temperatura zavisi od načina spaterovanja (distribucije masa) i broja spaterovanih atoma. Kod idealnih beskonačnih struktura aktivaciona temperatura je $T_{ac} = 0 K$.

6. Razlike u fononskim spektrima između idealnih i film-struktura se smanjuju sa povećanjem debljine filma i kada $N_z \rightarrow \infty$ one nestaju.

4. NISKOTEMPERATURSKE OSOBINE DEFORMISANIH FILMOVA

Unutrašnja energija rešetke se računa po obrascu:

$$U = 3 \sum_{\vec{k}} E(\vec{k}) \left\{ \exp \left[\frac{E_s(\vec{k})}{\theta} \right] - 1 \right\}^{-1}; \quad \theta = k_B T, \quad (4.1)$$

gde je k_B - Bolcmanova konstanta a T - apsolutna temperatura.

Specifična toplota je, po definiciji, izvod unutrašnje energije po temperaturi i opisuje se izrazom:

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V. \quad (4.2)$$

koji zavisi od konkretnog oblika spektra dela normalnih moda.

U slučaju idealnog beskonačnog kristala, kada je broj elementarnih ćelija N veliki, suma u izrazu (4.1) se može zameniti integralom pa izraz (4.2) postaje:

$$C_V = \frac{\partial}{\partial T} \sum_s \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \frac{\hbar \omega_s(\vec{k})}{e^{\hbar \omega_s(\vec{k})/\theta} - 1}, \quad (4.3)$$

pri čemu se integracija vrši po prvoj Brillouenovoj zoni.

Pri vrlo niskim temperaturama, mode sa delovima $\hbar \omega_s(\vec{k}) \gg k_B T$ neizbežno daju mali udeo u veličini (4.3), jer pri tim uslovima podintegralni izraz eksponencijalno teži nuli. Fononski udeo u specifičnoj toploti za slučaj niskih temperatura u dugotalasnoj aproksimaciji ($k \rightarrow 0$) za izraz (4.3) dobija oblik:

$$C_V = \frac{\partial}{\partial T} \sum_s \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \frac{\hbar v_s(\vec{k}) k}{e^{\hbar v_s(\vec{k}) k/\theta} - 1}, \quad (4.4)$$

gde se integral uzima po celom \vec{k} -prostoru.

Za njegovo izračunavanje najzgodnije je da se uzme sferni koordinatni sistem, $d\vec{k} = k^2 dk d\Omega$. Ako se uvede smena promenljivih $\beta \hbar v_s(\vec{k}) k = x$ u integraciji po k , onda se integral u (4.4) može napisati u obliku:

$$C_V = \frac{\partial}{\partial T} \frac{(k_B T)^4}{(\hbar v)^3} \frac{3}{2\pi^2} \int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \frac{\partial}{\partial T} \frac{(k_B T)^4}{(\hbar v)^3} \frac{3}{2\pi^2} \sum_{n=1}^\infty \int_0^\infty x^3 e^{-nx} dx, \quad (4.5)$$

pa je za vrlo niske temperature:

$$C_V \approx \frac{2\pi^2}{5} k_B \left(\frac{k_B T}{\hbar v} \right)^3. \quad (4.6)$$

Za korišćenje formule (4.6) neophodno je da veličina $k_B T/\hbar$ bude mala u poredjenju sa svim frekvencijama fonona, koje ne leže u linearnom delu spektra. Odatle sledi da je veličina $k_B T/\hbar$ odgovorna za stvaranje male dolje karakterističnog dela spektra na granicama zona. Za dopunjavanje odgovarajućeg uslova temperatura T treba da bude znatno niža od sobne.

Pri niskim temperaturama toplotni kapacitet primetno opada i teži nuli kao T^3 . Ako metal postaje superprovodnik, opadanje je još brže.

Unutrašnja energija posmatranog fononskog sistema deformisanog filma računa se na osnovu formule (4.1). Sa sume prelazimo na integral po pravilu:

$$\frac{1}{N_x N_y (N_z + 1)} \sum_{k_x, k_y, k_z} F_{k_x k_y} \rightarrow \frac{a^2}{(2\pi)^2 k_z^{max}} \int dk_x dk_y dk_z F(k_x, k_y).$$

U ovom integralu ćemo preći na cilindrične koordinate:

$$\begin{aligned} \sum_{k_x, k_y, k_z} F_{k_x k_y} &\rightarrow \frac{3a^3}{4\pi^3} N_x N_y (N_z + 2) \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{k_z^{max}} dk_z \int_0^{k_z^{max}} k F(k) dk = \\ &= \frac{a^2}{2\pi} N_f \int_0^{k_z^{max}} k F(k) dk, \end{aligned}$$

jer je:

$$k_z^{max} = \frac{N_z + 1}{N_z + 2} \frac{\pi}{a_z}; \quad k_{max} = \frac{2\pi}{a} \sqrt{2}; \quad N_f = N_x N_y (N_z + 1).$$

Na taj način izraz za unutrašnju energiju prelazi u:

$$U_{df} = \frac{3}{2\pi} N_f q_s^2 E_s (I_1 + I_2), \quad (4.7)$$

gde su:

$$I_1 = \int_0^{x_m} \frac{x dx}{\exp \left[\frac{E_s}{\theta} (1 + \sqrt{1 + x^2}) \right] - 1}; \quad I_2 = \int_0^{x_m} \frac{x \sqrt{1 + x^2} dx}{\exp \left[\frac{E_s}{\theta} (1 + \sqrt{1 + x^2}) \right] - 1},$$

$$x = \frac{a}{q_s} k; \quad x_m = \frac{2\pi}{q_s} \sqrt{2}.$$

Smenom integracione promenljive:

$$\varepsilon = E_s (1 + \sqrt{1 + x^2}),$$

ovi integrali se svode na:

$$I_1 = \frac{1}{E_s^2} \int_{\varepsilon_1}^{\varepsilon_2} \frac{\varepsilon d\varepsilon}{e^{\varepsilon/\theta} - 1} - \frac{1}{E_s} \int_{\varepsilon_1}^{\varepsilon_2} \frac{d\varepsilon}{e^{\varepsilon/\theta} - 1}, \quad (4.8)$$

$$I_2 = \frac{1}{E_s^3} \int_{\varepsilon_1}^{\varepsilon_2} \frac{\varepsilon^2 d\varepsilon}{e^{\varepsilon/\theta} - 1} - \frac{2}{E_s^2} \int_{\varepsilon_1}^{\varepsilon_2} \frac{\varepsilon d\varepsilon}{e^{\varepsilon/\theta} - 1} + \frac{1}{E_s} \int_{\varepsilon_1}^{\varepsilon_2} \frac{d\varepsilon}{e^{\varepsilon/\theta} - 1}, \quad (4.9)$$

pri čemu su granice integracije:

$$\varepsilon_1 = 2 E_s; \quad \varepsilon_2 = E_s \left(1 + \sqrt{1 + \frac{8\pi^2}{q_s^2}} \right).$$

U izrazima (4.2) i (4.3) figurišu podintegralne funkcije istog tipa koje se mogu izraziti preko geometrijske progresije:

$$\frac{1}{e^\xi - 1} = \sum_{\nu=1}^{\infty} e^{-\nu\xi}.$$

Nakon ove zamene i višestruke parcijalne integracije odgovarajućih integrala, ovi izrazi dobijaju konačnu formu:

$$I_1 = \left(\frac{\theta}{E_s} \right)^2 \left[Z_2\left(\frac{\varepsilon_1}{\theta}\right) - Z_2\left(\frac{\varepsilon_2}{\theta}\right) + \frac{\varepsilon_1}{\theta} Z_1\left(\frac{\varepsilon_1}{\theta}\right) - \frac{\varepsilon_2}{\theta} Z_1\left(\frac{\varepsilon_2}{\theta}\right) \right] + \frac{\theta}{E_s} \left[Z_1\left(\frac{\varepsilon_2}{\theta}\right) - Z_1\left(\frac{\varepsilon_1}{\theta}\right) \right],$$

$$I_2 = \left(\frac{\theta}{E_s} \right)^3 \left[\left(\frac{\varepsilon_1}{\theta}\right)^2 Z_1\left(\frac{\varepsilon_1}{\theta}\right) - \left(\frac{\varepsilon_2}{\theta}\right)^2 Z_1\left(\frac{\varepsilon_2}{\theta}\right) + 2\frac{\varepsilon_1}{\theta} Z_2\left(\frac{\varepsilon_1}{\theta}\right) - 2\frac{\varepsilon_2}{\theta} Z_2\left(\frac{\varepsilon_2}{\theta}\right) + \right. \\ \left. + 2Z_3\left(\frac{\varepsilon_1}{\theta}\right) - 2Z_3\left(\frac{\varepsilon_2}{\theta}\right) \right] - \left(\frac{\theta}{E_s} \right)^2 \left[\frac{\varepsilon_1}{\theta} Z_1\left(\frac{\varepsilon_1}{\theta}\right) - \frac{\varepsilon_2}{\theta} Z_1\left(\frac{\varepsilon_2}{\theta}\right) + \right. \\ \left. + Z_2\left(\frac{\varepsilon_1}{\theta}\right) - Z_2\left(\frac{\varepsilon_2}{\theta}\right) \right] + \frac{\theta}{E_s} \left[Z_1\left(\frac{\varepsilon_1}{\theta}\right) - Z_1\left(\frac{\varepsilon_2}{\theta}\right) \right].$$

U ovim izrazima figuriše Disonova funkcija $Z_r(\xi)$:

$$Z_r(\xi) = \sum_{\nu=1}^{\infty} \nu^{-r} e^{-\nu\xi}; \quad \text{za } \xi > 0.$$

Zamenom nadjenih integrala u (4.1) dobijamo konačan izraz za unutrašnju energiju:

$$\begin{aligned}
U_{df} = & \frac{3}{2\pi} N_f q_s^2 \theta \left\{ 2 \left(\frac{\theta}{E_s} \right)^2 \left[Z_3 \left(\frac{\varepsilon_1}{\theta} \right) - Z_3 \left(\frac{\varepsilon_2}{\theta} \right) \right] + \right. \\
& + \frac{\theta}{E_s} \left[\left(2 \frac{\varepsilon_1}{E_s} + 1 \right) Z_2 \left(\frac{\varepsilon_1}{\theta} \right) - \left(2 \frac{\varepsilon_2}{E_s} + 1 \right) Z_2 \left(\frac{\varepsilon_2}{\theta} \right) \right] + \\
& \left. + \left(\frac{\varepsilon_1^2}{E_s^2} - \frac{\varepsilon_1}{E_s} + 2 \right) Z_1 \left(\frac{\varepsilon_1}{\theta} \right) - \left(\frac{\varepsilon_2^2}{E_s^2} - \frac{\varepsilon_2}{E_s} + 2 \right) Z_1 \left(\frac{\varepsilon_2}{\theta} \right) \right\}. \quad (4.10)
\end{aligned}$$

Ovo predstavlja izraz za unutrašnju energiju fononskog podsistema u film-strukturama sa narušenom translacionom simetrijom u funkciji temperature.

Kao što je u uvodnom delu bilo rečeno, jedna od najvažnijih karakteristika termodinamičkog ponašanja sistema je specifična toplota, jer se iz nje može videti fononski udeo.

Specifičnu toplotu za posmatranu film-strukturu naći ćemo koristeći standardan izraz (ali obračunatu po jednoj elementarnoj ćeliji):

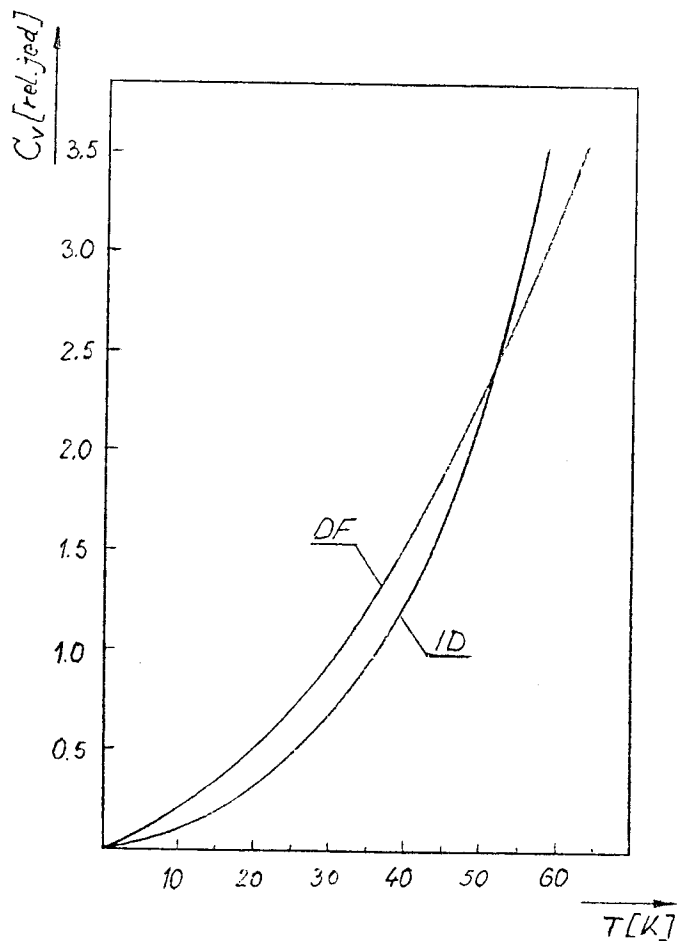
$$C_V = \frac{1}{N_f} \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{k_B}{N_f} \frac{\partial U}{\partial \theta}.$$

Nakon nalaženja odgovarajućih izvoda dobijamo konačan izraz za traženu specifičnu toplotu:

$$\begin{aligned}
C_V = & \frac{3 q_s^2}{2 \pi} \sum_{j=1}^2 (-1)^{j+1} \left[\frac{\varepsilon_j}{\theta} \left(\frac{\varepsilon_j^2}{E_s^2} - \frac{\varepsilon_j}{E_s} + 2 \right) \left(e^{\frac{\varepsilon_j}{\theta}} - 1 \right)^{-1} + \right. \\
& \left. + \left(3 \frac{\varepsilon_j^2}{E_s^2} + 2 \right) Z_1 \left(\frac{\varepsilon_j}{\theta} \right) + \frac{2 \theta}{E_s} \left(3 \frac{\varepsilon_j}{E_s} + 1 \right) Z_2 \left(\frac{\varepsilon_j}{\theta} \right) + \frac{6 \theta^2}{E_s^2} Z_3 \left(\frac{\varepsilon_j}{\theta} \right) \right].
\end{aligned}$$

Numeričke kalkulacije ($n = 3$, $s = 2$, $p = 12$, $v_0 = 3$, $a_0 = 4$) za C_{df} i C_{id} prikazane su grafički na slici 4.1.

Grafik predstavlja specifične toplote idelanih struktura i tankog filma u temperaturskom intervalu do 60K.



Slika 4.1

Rezultati ovih analiza pokazuju sledeće:

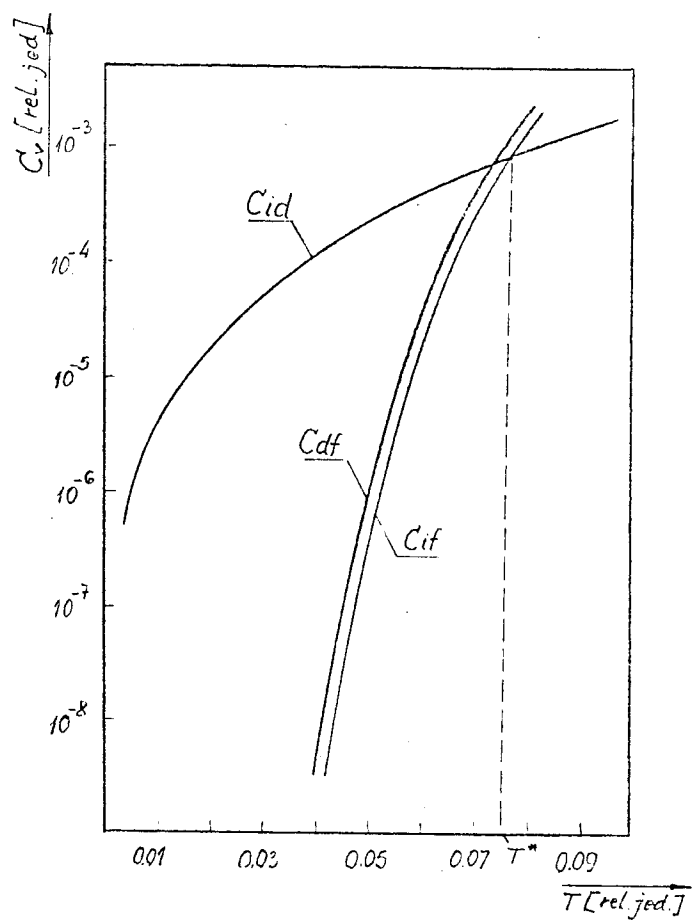
- Krive C_{df} i C_{id} imaju dve tačke preseka, kod $T_1 = 2.2 \text{ m K}$ i $T_2 = 51.1 \text{ K}$
- U intervalima $T < T_1$ i $T > T_2$ masivna specifična toplota je viša nego specifična toplota filma, dok je $C_{df} > C_{id}$ u intervalu $T_1 < T < T_2$. Ovaj bi rezultat mogao biti eksperimentalno dokazan s obzirom da merenja C_{id} u blizini temperature T_2 mogu biti relativno lako izvedena.

Posebno zanimljivo je ispitati niskotemperatursko ponašanje specifične toplote u idealnom filmu, spaterovanom filmu i odgovarajućoj idealnoj strukturi.

Rezultati ovih analiza dati su u tabeli 1

X	0.02	0.04	0.06	0.08	0.10
$C_{if} = C_i$	$9.6 \cdot 10^{-21}$	$3.5 \cdot 10^{-10}$	$9.6 \cdot 10^{-7}$	$4.7 \cdot 10^{-5}$	$4.5 \cdot 10^{-4}$
$C_{df} = C_a$	$10.6 \cdot 10^{-21}$	$3.8 \cdot 10^{-10}$	$10.6 \cdot 10^{-7}$	$5.1 \cdot 10^{-5}$	$5.0 \cdot 10^{-4}$
C_{df}/C_{if}	1.0969	1.0970	1.0971	1.0970	1.0971

Tabela 1.



Slika 4.2

Grafik predstavlja fononski doprinos niskotemperaturskom ponašanju specifične toplote u idealnim i spaterovanim film - strukturama i u odgovarajućim idealnim beskonačnim strukturama. Sa grafika se vidi da specifična toplota u spaterovanom filmu sa sniženjem temperature brže opada nego u odgovarajućoj idealnoj strukturi:

$$C_{id} \sim T^3 ; \quad C_{df} \sim T^{-1} e^{-\frac{const}{T}},$$

ili sporije raste sa povećanjem temperature (sve do T^*), pa se može zaključiti da je zagrevanje spaterovanog filma relativno teže nego zagrevanje odgovarajuće idealne strukture.

5. ZAKLJUČAK

Na osnovu analize fononskih stanja i spektara u film-strukturama sa narušenom translacionom simetrijom i idealnih struktura, došlo se do sledećih zaključaka:

1. Mehaničke vibracije u idealnim beskonačnim strukturama su ravni talasi u svim smerovima, a u tankim deformisanim filmovima su spoj stojećih talasa u z -pravcu i ravnih talasa u XY ravnima.

2. Kod film-struktura je veći elastični "manevarski prostor", bez kidanja medju-atomskih veza, nego u idealnim strukturama. Zbog toga je veća mehanička otpornost i viša tačka topljenja kod film-struktura u odnosu na masivne uzorke.

3. Sve tri akustičke frekvencije u masivnim strukturama teže nuli kada $k \rightarrow 0$ a u tankom filmu teže nekoj minimalnoj vrednosti različitoj od nule (koja zavisi od debljine i načina spaterovanja filma). Dakle, fononi u tankim strukturama imaju energetski gep. Zbog toga za njihovo pobudjivanje treba uložiti veću energiju ili ih zagrevati do neke aktivacione temperature T_{ac} , što znači da se sistem do T_{ac} ponaša kao "zamrznut" (fononi nisu prisutni, odnosno, fononi akustičkog tipa su prigušeni sve do T_{ac}).

Na osnovu termodinamičke analize u deformisanim film-strukturama i idealnim strukturama zaključuje se da:

1. Specifična toplota u oblasti niskih temperatura teži nuli kada temperatura teži nuli.

2. Kod idealnih struktura specifična toplota teži nuli kada temperatura teži nuli po zakonu θ^3 , a u deformisanim film-strukturama specifična toplota brže opada sa temperaturom po zakonu $\theta^{-1} \exp(-\Delta/\theta)$.

3. Pri niskim temperaturama specifična toplota film-struktura je niža od specifične toplote odgovarajućih idealnih struktura. Zato je za zagrevanje filmova potrebno uložiti veću energiju nego za zagrevanje masivnih uzoraka do istih temperatura. Dopingovanjem se dobijaju nešto umereniji rezultati za temperatursko ponašanje specifične toplote, što ukazuje da ona zavisi od vrste i načina spaterovanja.

Zbog svega toga se može zaključiti da se kod deformisanih film-struktura mogu ostvariti povoljniji superprovodni uslovi nego kod idealnih (neograničenih, tj. masivnih) uzoraka. To je jedan od vrlo bitnih uslova za objašnjavanje pojave visokotemperaturske superprovodnosti, bakar - oksidnih keramika, zato što je njihova struktura sitnozrnasta.

Postojanje energetskog gema (odsustvo fonona), ukazuje na činjenicu da ukoliko u sistemu postoje elementarni nosioci naelektrisanja oni bi se sve do određene temperature kretali bez otpora (idealna provodnost!).

6. LITERATURA

- [1] J.P.Šetrajić, *O problemu superfluidnog transfera u kondenzovanoj materiji*, Dr disertacija, PMF IF, N.Sad 1985.
- [2] B.S.Tošić, *Statistička fizika*, PMF IF, Novi Sad 1978.
- [3] Ch.Kittel, *Uvod u fiziku čvrstog stanja*, Sav.Admin. Beograd 1970.
- [4] A.S.Davydov, *Teoriya tverdogo tela*, Nauka, Moskva 1976.
- [5] L.I.Šif, *Kvantna mehanika*, V.Karadžić, Beograd 1968.
- [6] M.Pantić, *Fononska stanja u strukturama sa narušenom simetrijom*, Mr teza, FF PMF Beograd 1993.
- [7] N.Ashcroft, N.Mermin, *Fizika tverdogo tela*, Mir, Moskva 1979.
- [8] M.P.I.Kaganov and I.M.Lifshits, *Quasi-Particles*, Mir, Moskva 1979.
- [9] B.S.Tošić, J.P.Šetrajić, D.Lj.Mirjanić, Z.V.Bundalo, *Physica A* **184** (1992) 354.