

D-389

1999. 3. 26. 10:00
1000/99

UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET
INSTITUT ZA FIZIKU

УНИВЕРЗИТЕТ У НОВОМ САДУ
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ

ПРИМЉЕНО: 14. IX. 1999.	
ОРГАНИЗ.ЈЕД	БРОЈ
0603	9/238

- D I P L O M S K I R A D -

ELEKTRONSKI SPEKTRI U KRISTALNOJ
FILM-STRUKTURI SA DVE PODREŠETKE

M E N T O R

PROF. DR JOVAN ŠETRAJČIĆ

K A N D I D A T

R E N A T A F E H E R

Novi Sad, 1999. godine

Sadržaj

1 Uvod	4
2 Elektroni u neograničenim kristalima	5
2.1 Model kvazislobodnih elektrona	5
2.1.1 Energetske zone	5
2.1.2 Brzina, ubrzanje i efektivna masa	8
2.1.3 Statistika kvazislobodnih nosilaca	9
2.2 Spektri i stanja elektrona u neograničenim kristalima	10
2.2.1 Kristal sa primitivnom kubnom rešetkom	11
2.2.2 Kristalna struktura sa dve podrešetke	11
3 Elektroni u tankim filmovima	13
3.1 Kristalna film-struktura sa primitivnom kubnom rešetkom	13
3.1.1 Jednačine kretanja	14
3.1.2 Zakon disperzije	15
3.2 Kristalna film-struktura sa dve podrešetke	17
3.2.1 Model filma sa dve podrešetke	17
3.2.2 Jednačine kretanja	18
3.2.3 Zakon disperzije	20
4 Zaključak	22
5 Dodatak	23
5.1 Metod Grinovih funkcija	23
5.2 Jednodimenzionalni beskonačni kristal sa dve podrešetke	26
5.3 Karakteristični polinomi Čebiševa	28
6 Literatura	29

1 Uvod

Niskodimenzioni sistemi (tanki filmovi, superrešetke, kvantne žice i kvantne tačke) nalaze se danas (a i tokom poslednje dve decenije) na samom frontu istraživanja u oblasti fizike i fizičke elektronike [1,2]. Razvoj specijalnih tehnoloških postupaka (epitaksijski molekulskim snopom i naporavanje iz metal-organskih jedinjenja) omogućio je izradu tankih slojeva, čije su dimenzije manje od srednje dužine slobodnog puta nosilaca nanelektrisanja i iznose od nekoliko do nekoliko desetina nanometara. Stoga su u ovim slojevima izraženi kvantni efekti u smislu da je kvantomehanički postupak neophodan za opis kretanja elektrona na nivou cele strukture, a ne samo u okviru elementarne čelije kristala, što dovodi do bitno različitih fizičkih osobina ovih struktura u odnosu na masivne uzorke. Ove osobine se mogu kontinualno menjati, na vrlo jednostavan način (npr. promenom debljine slojeva ili sastava materijala) u dosta širokom opsegu. Mnoge od ovih osobina poželjne su u različitim primenama, što je dalo podstrek proučavanju ovih struktura, kako teorijski tako i eksperimentalno [1-3].

Od velikog značaja za teoriju čvrstog stanja je ispitivanje udela i uticaja elektronskog pod sistema na fizičke karakteristike materijala, jer su upravo elektroni nosioci svih transportnih i drugih fizički interesantnih procesa [4-7]. U ovom radu je, na osnovu modela kristalne film-strukture¹ sa primitivnom kubnom rešetkom (sačinjena od iste vrste atoma) [8-11], analizirana kristalna film-struktura sa dve podrešetke - tipa $NaCl$ (sačinjena od dve vrste naizmenično ponavljamajućih atoma). Ispitan je uticaj prisustva granica i debljine film-strukture na energetski spektar i moguća stanja elektrona (elektronski zakon disperzije). Dobijeni rezultati poredjeni su sa odgovarajućim za idealne beskonačne kristale, da bi se na osnovu toga uočile najbitnije razlike koje se javljaju usled ograničenosti kristalnih sistema.

Pomenuta analiza vršena je metodom dvovremenskih temperaturskih Grinovih funkcija² koji se danas veoma često koristi u kvantnoj teoriji čvrstog stanja. Zahvaljujući ugradjenoj statistici, taj metod se uspešno primenjuje kod izračunavanja kako mikroskopskih tako i makroskopskih, ravnotežnih i neravnotežnih svojstava kristala [7,12]. Primjenjeni metod je odabran zbog pogodnosti koje nudi definicija polova Grinovih funkcija³.

Ovde je najpre vršena analiza idealnih beskonačnih kristalnih struktura (sa primitivnom kubnom rešetkom i sa dve podrešetke), a zatim je isti metod primenjen na odgovarajuće film-strukture.

¹ Filmovi predstavljaju beskonačne strukture u svim kristalnim ravnima paralelnim dvema graničnim površima, koje su normalne na jedan prioritetan pravac, duž koga je posmatrani sistem ograničen.

² Postoje i drugi metodi pomoću kojih se ovaj problem može tretirati: metod Hajzenbergovih jednačina kretanja, metod malih perturbacija, metod jednočestičnih talasnih funkcija i sl. [5-7].

³ Realni delovi polova Grinovih funkcija definišu energije elementarnih ekscitacija (pobudjenja) koje se javljaju u sistemu (odakle se dobija njihov zakon disperzije), dok su imaginarni delovi proporcionalni vrednostima vremena života tih ekscitacija.



2 Elektroni u neograničenim kristalima

Translaciona invarijantnost idealnih kristalnih struktura [1-7] nameće periodičan (sa periodom kristalne rešetke) oblik mnogim fizičkim veličinama koje ih opisuju (na primer, periodična raspodela polja i potencijalna energija elektrona).

Jedan od glavnih zadataka teorije čvrstog stanja je proučavanje promena diskretnog energetskog spektra elektrona izolovanog atoma - pri približavanju atoma i obrazovanju kristalne strukture. U ovom procesu periodično polje kristala i interakcija medju atomima dovodi do cepanja energetskih nivoa elektrona slobodnih atoma. Pošto se kristal može tretirati kao gigantski molekul, to kvantna stanja elektrona u tom molekulu, zbog Paulijevog principa isključenja, moraju biti okarakterisana različitim kvantnim brojevima što ima za posledicu formiranje čitavog spektra energetskih nivoa na mestu jednog nivoa u izolovanom atomu [1,4-7]. Umesto jednog energetskog nivoa, jednakog za svih N izolovanih atoma, u čvrstom telu se pojavljuje N blisko rasporedjenih nivoa, koji obrazuju energetsku zonu. Cepanje energetskih nivoa je najizrazitije za spoljašnje (valentne) nivoe, jer se talasne funkcije spoljašnjih valentnih elektrona susednih atoma medjusobno veoma preklapaju, dovodeći do kolektiviziranosti ovih stanja, kojima se na taj način atomi povezuju u kristal - gigantski molekul.

Ovi kolektivizirani elektroni, kojima se inače opisuju najkarakterističnija svojstva metala, nisu vezani sa atomima kristalne rešetke i mogu da se premeštaju po celoj zapremini metala. Međutim, čak i kada elektron napusti atom u kristalu, on se pod dejstvom primjenjenog električnog polja ne kreće slobodno već je podvrgnut uticaju kristalnog polja. Ovaj uticaj se može usrednjeno uzeti u obzir uvodjenjem efektivne mase kvazislobodnih nosilaca nanelektrisanja [1,4-7]. Takođe, zbog specifičnosti kretanja elektrona u kristalnom polju, anomalnog ponašanja kvazislobodnih elektrona na krajevima valentne zone, uvodi se pojam kvazislobodnih nosilaca nanelektrisanja - šupljina.

2.1 Model kvazislobodnih elektrona

Veliki broj važnih fizičkih osobina mogu se razumeti polazeći od klasičnog modela slobodnih elektrona, po kome se najslabije vezani elektroni atoma kreću slobodno po zapremini metala. Valentni elektroni postaju provodnici elektriciteta i nazivaju se provodni elektroni. Sile izmedju provodnih elektrona i jona se zanemaruju, tj. smatra se da se provodni elektroni mogu kretati svuda u unutrašnjosti uzorka. Ukupna energija je jednaka kinetičkoj, što znači da se potencijalna ne uzima u obzir [1,4-6]. Klasična teorija je imala nekoliko uspeha, ali i nedostataka. U uspehe spadaju izvodjenje Omovog zakona ($j = \sigma \vec{E}$) i izvodjenje veze izmedju električne i toplotne provodnosti. Međutim, totalni neuspeh je doživel u objašnjenju toplotnog kapaciteta i paramagnetne susceptibilnosti provodnih elektrona. Zatim, pomoću klasične teorije ne može da se objasni postojanje dugog slobodnog puta elektrona. Pomenute pojave uspešno se opisuju pomoću modela kvazislobodnih elektrona.

2.1.1 Energetske zone

Nalaženje egzaktne kvantitativne teorije predstavlja važan, ali do sada nerešen problem teorije čvrstog stanja. Zato se pribegava određenim aproksimacijama, od kojih je jedna aproksimacija kvazislobodnih elektrona u kristalu. Tu se u nultoj aproksimaciji elektron posmatra kao slobodan, dok se periodično kristalno polje tretira kao perturbacija (odnosno kao malo narušenje nulte energije).

Dozvoljene vrednosti energije slobodnog elektrona se protežu neprekidno od nula do besko-

načno:

$$E = \frac{p^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}, \quad p = \hbar k, \quad k = \frac{2\pi}{\lambda}, \quad (2.1)$$

gde je k intezitet talasnog vektora slobodnog elektrona. Izraz pokazuje paraboličnu zavisnost izmedju energije i talasnog vektora slobodnog elektrona.

Elektroni ne mogu posedovati sve vrednosti energije u kristalu, tako da iz parabolične krive $E(k)$ moraju biti isključeni delovi koji odgovaraju zabranjenim zonama. Granice dozvoljenih zona moguće je formalno odrediti posmatranjem difrakcije elektronskih talasa na kristalnim ravnima, koja se ostvaruje shodno Bragovom zakonu: $n\lambda = 2dsin\theta$. Posmatranjem upadnog elektronskog talasa sa pravcem prostiranja normalnim na pomenute kristalne ravni, za slučaj kubne rešetke ($d = a$, gde je a - parametar rešetke) dobija se iz Bragovog zakona $\lambda = \frac{2a}{n}$. Ovo je talasna dužina elektronskih talasa koji bivaju reflektovani od kristalnih ravni, odnosno koji se ne mogu prostirati kroz kristal. Ona određuje i vrednosti talasnog vektora koje elektron ne može imati u kristalu:

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{n\pi}{a}, \quad n = \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.2)$$

U okolini zabranjenih vrednosti $k = \pm \frac{\pi}{a}, \pm \frac{2\pi}{a}, \dots$ zavisnost energije od talasnog vektora $E(k)$ odstupa od paraboličnog oblika i dolazi do formiranja zabranjenih zona $\Delta E_1, \Delta E_2, \dots$

Oblasti vrednosti talasnog vektora k pri kojima se energija elektrona E menja neprekidno, a na granicama doživjava prekid, nazivaju se Briluenovim zonama.

Oblast u k -prostoru izmedju $-\frac{\pi}{a}$ i $+\frac{\pi}{a}$ se naziva prvom Briluenovom zonom. Zbog periodičnosti kristala fizički su neekvivalentne samo tačke recipročnog k -prostora koje pripadaju prvoj Briluenovoj zoni, dok su fizički ekvivalentne sve vrednosti talasnog vektora \vec{k}' i \vec{k} koje se razlikuju za vektor translacije recipročne rešetke \vec{K} : $\vec{k}' = \vec{k} + \vec{K}$, gde \vec{k} pripada prvoj Briluenovoj zoni. U jednodimenzionom slučaju intenzitet vektora \vec{K} je celobrojni umnožak intenziteta primitivnog vektora recipročne rešetke [1,4-6], pa se stanja elektrona sa vrednostima talasnog vektora inteziteta k i talasnih vektora inteziteta k' ($\vec{k}' = \vec{k} + n\frac{2\pi}{a}$, $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$) fizički ne razlikuju. To daje mogućnost da se sve Briluenove zone svedu na prvu zonu.

Za kristal konačnih dimenzija Born-Karmanovi ciklični uslovi [1,4-7] daju diskrete⁴ vrednosti kvazitalasnog vektora unutar prve Briluenove zone:

$$k_i = \frac{2\pi}{a_i} \frac{n_i}{N_i}, \quad i = 1, 2, 3, \quad (2.3)$$

gde je n_i ceo broj. U svakoj dozvoljenoj zoni postoji N energetskih nivoa (N -broj atoma u kristalu) koji odgovaraju vrednostima kvazitalasnog vektora u prvoj Briluenovoj zoni:

$$k = \frac{2\pi}{a_i} \frac{n_i}{N_i}, \quad n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \pm \frac{N}{2}, \quad (2.4)$$

rasporedjenih ravnomoerno sa medjusobnim razmakom $\Delta k = \frac{2\pi}{Na}$. Na svakom od N nivoa mogu se nalaziti po 2 elektrona sa suprotno orijentisanim spinovima - u zoni kristala može biti najviše $2N$ elektrona.

Širina dozvoljene zone se može proceniti pomoću Hajzenbergove relacije neodredjenosti:

$$\Delta E \Delta t \sim \hbar. \quad (2.5)$$

⁴ U slučaju kristala dovoljno velikih razmera može se smatrati da je k_i kvazineprekidno [1].

U izolovanom atomu srednje vreme života elektrona u pobudjenom stanju je $\tau \sim 10^{-8}$ s što za širinu energetskih nivoa daje $\Delta E \sim 10^{-7}$ eV.

U toku obrazovanja čvrstog tela elektroni se kolektiviziraju prolazeći kroz potencijalne barijere tunel efektom. Prozračnost pravougaone barijere⁵ se procenjuje kao [1]:

$$D \approx \exp \left(-\frac{2d}{\hbar} \sqrt{2m_e(U_0 - E)} \right) , \quad (2.6)$$

gde su: $U_0 - E$ - visina barijere koja je za valentne elektrone reda veličine energije ionizacije atoma (~ 10 eV), d - širina barijere koja je srazmerna periodu kristalne rešetke ($\sim 10^{-10}$ m). Ako se brzina elektrona u atomu proceni kao

$$\bar{v} = \sqrt{\frac{2\bar{E}}{m_e}} = \sqrt{\frac{\hbar^2 n^{2/3}}{m_e^2}} \approx 10^6 \frac{\text{m}}{\text{s}} , \quad (2.7)$$

to za jednu sekundu elektron udari $\frac{\bar{v}}{l}$ puta u barijeru ($l \sim 10^{-10}$ m - širina potencijalne jame), pa je učestanost prolaska kroz barijeru:

$$f = \frac{\bar{v}}{l} D = \frac{\bar{v}}{l} \exp \left(-\frac{2d}{\hbar} \sqrt{2m_e(U_0 - E)} \right) . \quad (2.8)$$

Srednje vreme pripadanja elektrona datom atomu je

$$\tau = \frac{1}{f} = \frac{l}{\bar{v}} \exp \left(\frac{2d}{\hbar} \sqrt{2m_e(U_0 - E)} \right) \approx 10^{-15} \text{s} , \quad (2.9)$$

tako da se za širinu dozvoljenih zona dobija

$$\Delta E \sim \frac{\hbar}{\tau} \sim 1 \text{eV} . \quad (2.10)$$

Širina unutrašnjih dozvoljenih zona je manja od širine spoljašnjih dozvoljenih zona zbog naglog skoka visine potencijalne barijere. Na osnovu širine dozvoljene zone može se proceniti rastojanje izmedju susednih energetskih nivoa u njoj. U svakoj zoni postoji N nivoa ($N \approx 10^{22} \text{cm}^{-3}$) tako da je rastojanje izmedju susednih energetskih nivoa u dozvoljenoj zoni reda veličine 10^{-22} eV po cm^3 materijala.

Širina zabranjenih zona je reda veličine dozvoljenih zona. Pošto više energetske zone imaju veću širinu od nižih, rastojanje izmedju njih je manje, dok je za niže zone situacija obrnuta. Energija koju elektroni stiču pod dejstvom spoljašnjeg izvora struje je reda veličine 10^{-19} eV tako da oni veoma lako mogu ostvariti unutarzonske prelaze. Potrebne energije za medjuzonske prelaze su reda veličine nekoliko eV, koje se mogu ostvariti tek pri izuzetno velikoj razlici potencijala ($U \approx 10$ kV). Dakle, pri dejstvu spoljašnjih činilaca premeštaju se elektroni unutar dozvoljene zone ili oni koji steknu dovoljno energije za medjuzonske prelaze iz valentne u dozvoljenu provodnu zonu.

Prema veličini energetskog procepa, materijali se dele na provodne i na neprovodne [1,6].

Provodni materijali imaju nezauzete energetske nivoe koji leže neposredno iznad zauzetih valentnih nivoa. Postoje dve vrste provodnika:

- Provodnici prve vrste - kod kojih je valentna zona do pola popunjena.
- Provodnici druge vrste - kod kojih dolazi do prekrivanja valentne i provodne zone.

Neprovodni materijali su oni kod kojih je valentna zona u potpunosti popunjena. Prema veličini energetskog procepa oni se dele na:

- Dielektrike - kod kojih je širina energetskog procepa veća od 3.5 eV.
- Poluprovodnike - kod kojih je širina energetskog procepa manja od 3.5 eV.

⁵Relativni odnos propuštenog i upadnog elektronskog fluksa.

2.1.2 Brzina, ubrzanje i efektivna masa

Kako kvazislobodni elektroni u metalu čine degenerisan gas, odnosno, podvrgavaju se kvantnoj Fermi-Dirakovojoj statistici, potrebno je napustiti klasičnu predstavu elektrona kao čestice i posmatrati njegovu dualnu (čestično-talasnu) kvantomehaničku prirodu [1,3-7].

Pogodan način prikazivanja elektrona je u vidu talasnog paketa gde je čestični aspekt elektrona izražen njegovom lokalizacijom u intervalu gde je rezultujuća amplituda talasnog paketa različita od nule. Srednja brzina elektrona je odredjena grupnom brzinom talasnog paketa:

$$v = \frac{d\nu}{d(1/\lambda)} = \frac{d\omega}{dk} \implies \vec{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla E(\vec{k}) . \quad (2.11)$$

Sa druge strane, brzina priraštaja energije elektrona, pod dejstvom neke spoljašnje sile \vec{F} , u kristalu je jednaka:

$$\frac{dE}{dt} = \vec{F} \cdot \vec{v} , \quad (2.12)$$

pa se na osnovu toga dobija izraz za ubrzanje elektrona:

$$\vec{a} \equiv \frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial \vec{k}} \right) = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial \vec{k} \partial \vec{k}} \vec{F} \equiv \frac{\vec{F}}{m^*} , \quad (2.13)$$

gde veličina $\frac{1}{m^*}$ predstavlja tenzor recipročne efektivne mase:

$$\left(\frac{1}{m^*} \right)_{\alpha\beta} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial k_\alpha \partial k_\beta} ; \quad \alpha, \beta = x, y, z . \quad (2.14)$$

Posebno je interesantna primitivna kubna rešetka kod koje se uslov da vektor \vec{k} pripada redukovanim području svodi na

$$-\frac{\pi}{a} < k_\alpha < \frac{\pi}{a} \quad \alpha = x, y, z . \quad (2.15)$$

Za ovakvu rešetku tenzor recipročne efektivne mase je simetričan i ima medjusobno jednakе dijagonalne komponente. Ukoliko se ta osobina tenzora primeni na izraz (2.13), odnosno (2.1), dobija se zakon disperzije istog oblika kao i kod slobodnog elektrona, ali sa efektivnom masom m^* :

$$E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} . \quad (2.16)$$

Smisao uvođenja efektivne mase sastoji se u tome da se složeni zakoni kretanja u kristalu mogu formalno svesti na zakone klasične fizike. Znači, posredstvom efektivne mase je uračunato rezultujuće dejstvo periodičnog električnog polja kristalne rešetke na jedan kvazislobodan elektron.

Zavisno od zakrivljenosti energetske površine, efektivna masa može da bude negativna ili pozitivna (što odgovara elektronima ili šupljinama, respektivno). Ubrzanje nosioca nanelektrisanja u kristalnoj rešetki određeno je, ne slobodnom elektronskom masom, već skupom veličina (2.14) koje se menjaju pomeranjem elektronskog stanja u prostoru talasnog vektora. Efektivna masa elementarnih nosioca nanelektrisanja je pozitivna oko sredine, a negativna pri kraju redukovanih područja.

Ove anomalne oblasti ($m^* < 0$) mogu da se objasne posmatrajući kretanje elektrona pod dejstvom konstantnog spoljašnjeg električnog polja \vec{E} . Ako je pre uključenja polja \vec{E} njegova energija bila jednaka nuli (tj. nalazi se u centru Briluenove zone), posle priključenja \vec{E} , na elektron počinje da deluje konstantna sila $-e\vec{E}$, pa kvaziimpuls elektrona linearno raste sa vremenom.

Svaki put kada elektron dostigne granicu Briluenove zone $k = +\pi/a$ njegov kvaziimpuls se skokovito menja u suprotni ($k = -\pi/a$). Takvu skokovitu promenu doživljava i brzina elektrona: pozitivnim vrednostima brzine odgovara kretanje elektrona u pravcu delovanja sile, a negativnim nasuprot delovanju te sile. Dakle, kretanje elektrona u kristalu ima oscilatorni karakter. Oblasti negativne mase odgovaraju situaciji da se elektron usporava iako na njega deluje spoljašnja sila sa težnjom da mu poveća brzinu ($k' < k < \pi/a$), odnosno ubrzava iako spoljašnja sila teži da mu smanji brzinu ($-\pi/a < k < -k'$). Medjutim, u toj oblasti faznog \vec{k} -prostora negativno nanelektrisani elektron negativne mase, može da se tretira kao pozitivno nanelektrisana čestica pozitivne mase - šupljina koja se kreće u skladu sa delovanjem polja $+e\vec{E}$. Prema tome, vidi se da se stanje u zoni može opisati prisustvom kvazičestice koja poseduje istu količinu nanelektrisanja kao i elektron, samo suprotnog predznaka. Tim kvazičesticama pripisani su talasni vektori nezauzetih kvantnih stanja, pa se nazivaju šupljinama. Njihov smer kretanja u spoljašnjem polju je suprotan od smera kretanja elektrona. Promena predznaka nanelektrisanja ne utiče na izraz za ubrzanje ako se istovremeno promeni i predznak efektivne mase. Kako je masa elektrona pri vrhu zone negativna, efektivna masa šupljina je pozitivna. Znači, šupljine su kvazičestice pozitivnog nanelektrisanja i pozitivne mase. Dakle, kretanje elektrona na krajevima zona može da se posmatra i kao kretanje pozitivno nanelektrisanih šupljina [1,6].

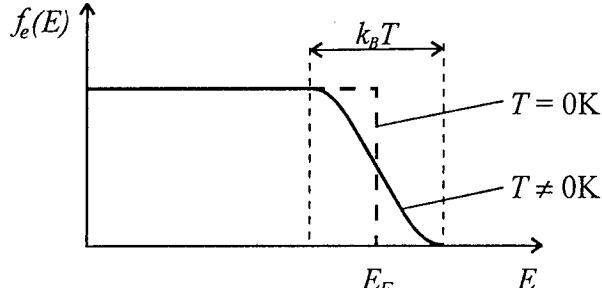
2.1.3 Statistika kvazislobodnih nosilaca

Raspodela elektrona u kristalu po energijama, pri nekoj temperaturi T , pokorava se Fermi-Dirakovoj statistici [1,6]:

$$f_e(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1}, \quad (2.17)$$

gde $f_e(E)$ - predstavlja verovatnoću da je energetski nivo sa energijom E zauzet. Popunjavanje nivoa vrši se prema Paulijevom principu. Kao posledica toga pri nultoj temperaturi svi nivoi do nekog odredjenog su popunjeni sa po 2 elektrona, a svi nivoi iznad pomenutog su prazni. Najviši popunjen nivo pri $T = 0$ se naziva Fermijev nivo, a energija koja odgovara tom nivou naziva se Fermijeva energija E_F . Svi nivoi viši od Fermijevog su prazni, tako da funkcija raspodele na apsolutnoj nuli, ima vrednost:

$$f_e(E) = \begin{cases} 1 & E < E_F \\ 0 & E > E_F \end{cases}$$



Slika 2.1: Fermijeva funkcija pri $T = 0$ i $T \neq 0$

Temperatura pridružena Fermijevoj energiji naziva se temperatura degeneracije. Elektronski gas je degenerisan u području gde važi : $T \leq T_F$. Sa porastom temperature jedan deo elektrona se pobudi i prelazi na više energetske nivo. Verovatnoća nalaženja elektrona na nižim nivoima $E < E_F$ se smanji, ali se za isto toliko poveća verovatnoća nalaženja elektrona na višim nivoima $E > E_F$. Granica popunjenoosti se rasplinjava za veličinu $k_B T$ (slika 2.1). Za sve temperature iznad apsolutne nule uvek važi $f(E_F) = \frac{1}{2}$.

Verovatnoća nalaženja šupljina na nekom energetskom nivou jednaka je verovatnoći ne-nalaženja elektrona na tom nivou: $f_p = 1 - f_e$.

Pri vrlo visokoj temperaturi Fermi-Dirakova statistika prelazi u Boltzmanovu, i elektronski (šupljinski) gas se ponaša kao klasičan gas.

2.2 Spektri i stanja elektrona u neograničenim kristalima

Ovde su razmotrena neka svojstva elektronskog podsistema idealnog beskonačnog kristala sa primitivnom kubnom rešetkom, kao i kristala koji se sastoji od dve podrešetke (kristal tipa $NaCl$). Polazi se od hamiltonijana kvazislobodnih elektrona [5,7] koji u konfiguracionom prostoru i harmonijskoj aproksimaciji ima oblik:

$$H = \sum_{\vec{n}} \Delta_{\vec{n}} a_{\vec{n}}^+ a_{\vec{n}} - \sum_{\vec{n}, \lambda} W_{\vec{n}, \vec{n} + \vec{\lambda}} a_{\vec{n}}^+ a_{\vec{n} + \vec{\lambda}}, \quad (2.18)$$

gde su $a_{\vec{n}}^+$ i $a_{\vec{n}}$ operatori kreacije i anihilacije elektrona na čvoru kristalne rešetke \vec{n} . Veličina $\Delta_{\vec{n}}$ predstavlja energiju elektrona lokalizovanog na čvoru rešetke \vec{n} , a $W_{\vec{n}, \vec{n} + \vec{\lambda}}$ su matrični elementi elektronskog transfera izmedju susednih čvorova rešetke. Ovde je pretpostavljeno da je broj elektrona po atomu relativno mali (jedan elektron po atomu) tako da se Kulonova interakcija elektrona može zanemariti. U tom slučaju, lako se pokazuje da je hamiltonian (2.18) ekvivalentan hamiltonijanu elektronskog gasa u aproksimaciji efektivne mase [1,4,5]:

$$H = \sum_{\vec{k}} E_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}}, \quad E_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2 m^*}. \quad (2.19)$$

Hamiltonian (2.18) napisan u harmonijskoj i aproksimaciji najблиžih suseda ima oblik:

$$\begin{aligned} H = & \sum_{n_x n_y n_z} \Delta_{n_x n_y n_z} a_{n_x n_y n_z}^+ a_{n_x n_y n_z} - \sum_{n_x n_y n_z} a_{n_x n_y n_z}^+ [W_x (a_{n_x+1, n_y, n_z} + a_{n_x-1, n_y, n_z}) + \\ & + W_y (a_{n_x, n_y+1, n_z} + a_{n_x, n_y-1, n_z}) + W_z (a_{n_x, n_y, n_z+1} + a_{n_x, n_y, n_z-1})]. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Svojstva posmatranog elektronskog sistema analiziraju se pomoću antikomutatorske Grinove funkcije [7-12]

$$G_{\vec{n}, \vec{m}}(t) = \Theta(t) \langle \{a_{\vec{n}}(t), a_{\vec{m}}^+(0)\} \rangle, \quad (2.21)$$

koja zadovoljava jednačinu kretanja (videti Dodatak 5.1):

$$i\hbar \frac{d}{dt} G_{\vec{n}, \vec{m}}(t) = i\hbar \delta_{\vec{n}, \vec{m}} \delta(t) + \Theta(t) \langle \{[a_{\vec{n}}, H], a_{\vec{m}}^+\} \rangle. \quad (2.22)$$

Za izračunavanje komutatora $[a_{\vec{n}}, H]$ koriste se standardne fermionske komutatorske relacije:

$$\{a_{\vec{n}}, a_{\vec{m}}^+\} = \delta_{\vec{n}, \vec{m}}, \quad \{a_{\vec{n}}, a_{\vec{m}}\} = \{a_{\vec{n}}^+, a_{\vec{m}}^+\} = 0, \quad (2.23)$$

tako da jednačina kretanja dobija sledeći oblik:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} G_{\vec{n}, \vec{m}}(t) = & i\hbar \delta_{\vec{n}, \vec{m}} \delta(t) + \Delta_{\vec{n}} G_{\vec{n}, \vec{m}}(t) - \\ & - [W_x (G_{n_x+1, n_y, n_z; \vec{m}}(t) + G_{n_x-1, n_y, n_z; \vec{m}}(t)) + W_y (G_{n_x, n_y+1, n_z; \vec{m}}(t) + \\ & + G_{n_x, n_y-1, n_z; \vec{m}}(t)) + W_z (G_{n_x, n_y, n_z+1; \vec{m}}(t) + G_{n_x, n_y, n_z-1; \vec{m}}(t))]. \end{aligned} \quad (2.24)$$

Pošto se radi o beskonačnoj translaciono invarijantnoj strukturi, moguće je izvršiti potpuni vremensko-prostorni Furije-transform Grinovih funkcija, Kronekerovih simbola i delta funkcije:

$$G_{\vec{n}, \vec{m}}(t) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega G_{\vec{k}}(\omega) e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})-i\omega t}, \quad (2.25)$$

$$\delta_{\vec{n}, \vec{m}} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})}; \quad \delta(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega t}, \quad (2.26)$$

gde je $N \equiv N_x N_y N_z$ - ukupan broj elektrona u kristalu.

2.2.1 Kristal sa primitivnom kubnom rešetkom

U ovom slučaju uzimamo da je $\Delta_{\vec{n}} = \Delta$ i $W_x = W_y = W_z = W$ pa se nakon zamene Furije-transformacija (2.25) i (2.26) u jednačinu kretanja (2.24) dobija:

$$[\hbar\omega - \Delta + 2W(\cos ak_x + \cos ak_y + \cos ak_z)] G_{\vec{k}}(\omega) = \frac{i\hbar}{2\pi},$$

odakle dalje sledi:

$$G_{\vec{k}}(\omega) = \frac{i}{2\pi} \frac{1}{\omega - \omega_{\vec{k}}} \equiv \frac{i\hbar}{2\pi} \frac{1}{E - E_{\vec{k}}},$$

gde

$$E_{\vec{k}} = \hbar \omega_{\vec{k}} = \Delta - 2W(\cos ak_x + \cos ak_y + \cos ak_z) \quad (2.27)$$

predstavlja zakon disperzije vezanih elektrona [5,8-11]. Zakon disperzije slabo vezanih elektrona (degenerisan elektronski gas), kada je $\Delta = 6W$, ima oblik:

$$E_{\vec{k}} = 4W \left(\sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y}{2} + \sin^2 \frac{ak_z}{2} \right). \quad (2.28)$$

odnosno:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{\vec{k}} \equiv \frac{E_{\vec{k}}}{4W} &= \mathcal{F}_{k_x k_y} + \mathcal{G}_{k_z}, \\ \mathcal{F}_{k_x k_y} &= \sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y}{2}; \quad \mathcal{G}_{k_z} = \sin^2 \frac{ak_z}{2}. \end{aligned} \quad (2.29)$$

2.2.2 Kristalna struktura sa dve podrešetke

U kristalnoj strukturi sa dve podrešetke uvode se sledeće smene: $\Delta_{\vec{n}} \rightarrow \Delta_a$ i $\Delta_{\vec{n}+\vec{\lambda}} \rightarrow \Delta_b$ (a i b su dve različite vrste atoma od kojih je izgradjena kristalna rešetka). Jednačina kretanja za Grinove funkcije (2.24) se deli na dve jednačine kretanja za dve Grinove funkcije, koje posle Furije-transformacija (2.25) i (2.26) dobijaju oblik (videti Dodatak 5.2, za kristalni lanac - jednodimenzionali slučaj):

$$\hbar\omega G_{\vec{k}}^a(\omega) = \frac{i\hbar}{2\pi} + \Delta_a G_{\vec{k}}^a(\omega) - 2G_{\vec{k}}^b(\omega)(W_x \cos a_x k_x + W_y \cos a_y k_y + W_z \cos a_z k_z) \quad (2.30)$$

$$\hbar\omega G_{\vec{k}}^b(\omega) = \frac{i\hbar}{2\pi} + \Delta_b G_{\vec{k}}^b(\omega) - 2G_{\vec{k}}^a(\omega)(W_x \cos a_x k_x + W_y \cos a_y k_y + W_z \cos a_z k_z) \quad (2.31)$$

Zakon disperzije elektrona za beskonačni kristal sa dve podrešetke dobija se nalaženjem polova Grinovih funkcija u (ω, \vec{k}) prostoru [12]. Kako se rešenja gornjeg sistema jednačina mogu napisati kao $\frac{D_G}{D}$, gde su D_G determinanta promenljive, a D determinanta sistema, uslov za nalaženje polova Grinovih funkcija se svodi na izračunavanje nula determinante gornjeg sistema jednačina:

$$D = \begin{vmatrix} \hbar\omega - \Delta_a & 2(W_x \cos a_x k_x + \\ & + W_y \cos a_y k_y + W_z \cos a_z k_z) \\ 2(W_x \cos a_x k_x + & \hbar\omega - \Delta_b \\ + W_y \cos a_y k_y + W_z \cos a_z k_z) & \end{vmatrix} = 0 \quad (2.32)$$

Razvijeni oblik determinante (uz smenu $E = \hbar\omega$) je:

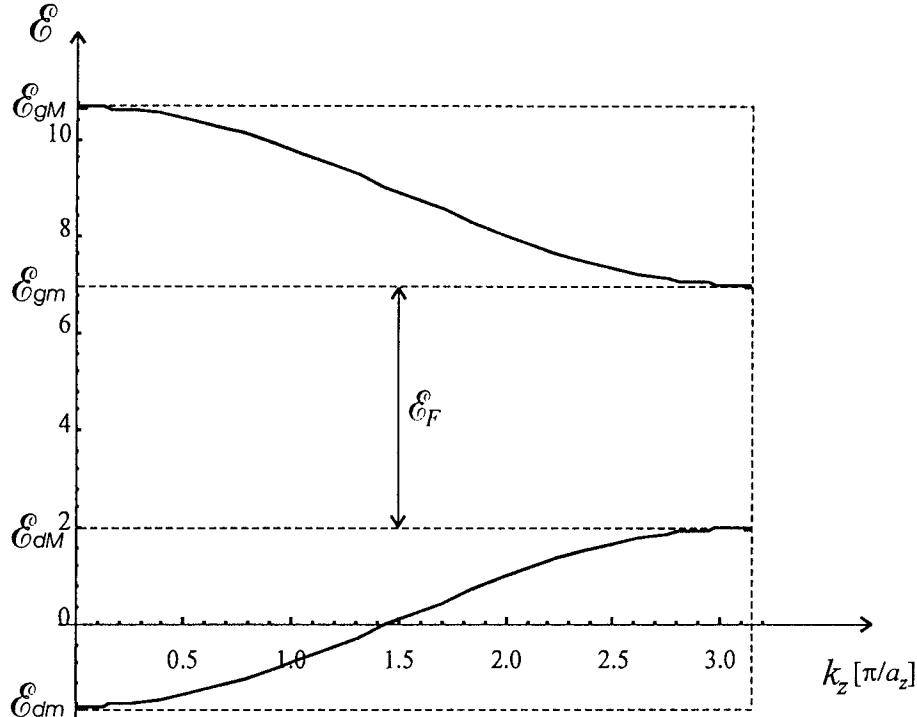
$$E^2 - E(\Delta_a + \Delta_b) + \Delta_a \Delta_b - 4 \left(\sum_{i=x,y,z} W_i \cos a_i k_i \right)^2 = 0 \quad (2.33)$$

Rešavanjem kvadratne jednačine, se dobija:

$$E = \frac{\Delta_a + \Delta_b}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(\Delta_a - \Delta_b)^2 + 16 \left(\sum_{i=1}^3 W_i \cos a_i k_i \right)^2} \quad (2.34)$$

Uvodjenjem novog parametra $\theta = \frac{\Delta_b}{\Delta_a}$, zakon disperzije postaje:

$$E = (1 + \theta) \frac{\Delta_a}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(1 - \theta)^2 \Delta_a^2 + 16 \left(\sum_{i=1}^3 W_i \cos a_i k_i \right)^2}. \quad (2.35)$$



Slika 2.2: Zakon disperzije elektrona kristala tipa $NaCl$

Na slici 2.2 predstavljen je zakon disperzije elektrona u beskonačnom kristalu sa dve podrešetke za $k_x = k_y = 0$, $\Delta_a = 6W$ i $\theta = 0.5$, pri čemu je uzeto da je $W_x = W_y = W_z = W$. Energetska zona kristalne strukture sa dve podrešetke je kontinualna, kao kod kristala sa primitivnom kubnom rešetkom, ali se cepta na dve podzone dozvoljenih elektronskih stanja, međusobno razdvojene zabranjenom zonom. Karakteristične redukovane energije ($\mathcal{E} \equiv \frac{\hbar\omega}{W}$) za ovaj sistem izračunate su iz jednačine (2.35) uzimajući $k_x = k_y = 0$ i $k_z = 0$ za \mathcal{E}_{dm} i \mathcal{E}_{gM} , kao i $k_z = \pi$ za \mathcal{E}_{dM} i \mathcal{E}_{gm} . Na taj način se dobija:

$$\mathcal{E}_{dm} = -1.68; \quad \mathcal{E}_{dM} = 2.00; \quad \mathcal{E}_{gm} = 7.00; \quad \mathcal{E}_{gM} = 10.68, \quad (2.36)$$

gde su $\mathcal{E}_{(d/g)m}$ minimalne i $\mathcal{E}_{(d/g)M}$ maksimalne redukovane energije donje d i gornje g dozvoljene energetske zone. Stoga je širina zabranjene energetske zone:

$$\mathcal{E}_F = \mathcal{E}_{gm} - \mathcal{E}_{dM} = 5.00. \quad (2.37)$$

3 Elektroni u tankim filmovima

Primenjujući isti metod i postupak izračunavanja kao kod neograničenih kristalnih sistema ovde će biti izračunat zakon disperzije u kristalnim film-strukturama. Za razliku od idealnih beskonačnih struktura, realni kristali ne poseduju osobinu translacione invarijantnosti. Postojanje izvesnih graničnih uslova, jedan je od uzroka narušenja simetrije [2,3]. Sistemi koji imaju dve paralelne granične površine nazivaju se filmovima. Posmatra se idealni tanki film kubne kristalne strukture, načinjen na substratu nekim tehničko-tehnološkim postupkom (napanjavanjem, spaterovanjem i sl.). Pojam idealni film koristi se u smislu nenarušenja kristalne strukture (bez prisustva defekata, primesa i sl.), a ne u smislu prostorne neograničenosti.

3.1 Kristalna film-struktura sa primitivnom kubnom rešetkom

Hamiltonian vezanih elektrona u tankim kristalnim filmovima možemo formirati polazeći od „balkovskog“ hamiltonijana (2.18), odnosno (2.20), koji u aproksimaciji najблиžih suseda ima razvijeni oblik [8-11]:

$$\begin{aligned} H = & \sum_{n_x n_y n_z} \Delta_{n_x n_y n_z} a_{n_x n_y n_z}^+ a_{n_x n_y n_z} - \sum_{n_x n_y n_z} a_{n_x n_y n_z}^+ \times \\ & \times (W_{n_x n_y n_z; n_x + 1, n_y n_z} a_{n_x + 1, n_y n_z} + W_{n_x n_y n_z; n_x - 1, n_y n_z} a_{n_x - 1, n_y n_z} + \\ & + W_{n_x n_y n_z; n_x n_y + 1, n_z} a_{n_x n_y + 1, n_z} + W_{n_x n_y n_z; n_x n_y - 1, n_z} a_{n_x n_y - 1, n_z} + \\ & + W_{n_x n_y n_z; n_x n_y n_z + 1} a_{n_x n_y n_z + 1} + W_{n_x n_y n_z; n_x n_y n_z - 1} a_{n_x n_y n_z - 1}) . \end{aligned} \quad (3.1)$$

Pošto su granične površine filma uzete normalno na z - pravac, indeks sloja n_z u (3.1) - uzima vrednosti $n_z = 0, 1, 2, \dots, N_z$, gde je $N_z \in [2, 20]$ kod ultratankih filmova. Indeksi n_x i n_y , koji određuju položaj atoma u svakom sloju, mogu imati proizvoljne celobrojne vrednosti (praktično, od $-\infty$, do $+\infty$).

Razmatraćemo analitički rešiv slučaj koji odgovara film-strukturi koja je „isečena“ iz beskonačne. Zbog postojanja granica filma uzećemo da je energija elektrona oblika [8]:

$$\begin{aligned} \Delta_{n_x n_y n_z} &= 0 \quad \text{za } n_z < 0 \text{ i } n_z > N_z , \\ \Delta_{n_x n_y n_z} &= \Delta \quad \text{za } 0 \leq n_z \leq N_z , \end{aligned} \quad (3.2)$$

a matrični elementi elektronskog preskoka sa sloja na sloj su:

$$\begin{aligned} W_{n_x n_y 0; n_x n_y n_z} &= 0 \quad \text{za } n_z < 0 , \\ W_{n_x n_y N_z; n_x n_y n_z} &= 0 \quad \text{za } n_z > N_z , \\ W_{n_x n_y n_z; n_x n_y, n_z + 1} &= W \quad \text{za } 0 \leq n_z \leq N_z - 1 , \\ W_{n_x n_y n_z; n_x n_y, n_z - 1} &= W \quad \text{za } 1 \leq n_z \leq N_z , \end{aligned} \quad (3.3)$$

pri čemu je za svaki sloj,

$$W_{n_x n_y n_z; n_x \pm 1, n_y n_z} = W_{n_x n_y n_z; n_x n_y \pm 1, n_z} \equiv W , \quad (3.4)$$

gde je W - konstanta elektronskog transfera idealnog kristala. Elektronski hamiltonijan tankih kristalnih filmova možemo sada napisati u obliku:

$$H = H_z + H_p ,$$

gde se H_z odnosi na unutrašnjost filma i ima isti oblik kao hamiltonijan beskonačnog kristala, dok H_p izražava uticaj prisustva granica film-strukture:

$$\begin{aligned} H_z &= \sum_{m_x m_y} \sum_{m_z=1}^{N_z-1} a_{m_x m_y m_z}^+ [\Delta a_{m_x m_y m_z} - W (a_{m_x+1, m_y m_z} + a_{m_x-1, m_y m_z} + \\ &+ a_{m_x m_y+1, m_z} + a_{m_x m_y-1, m_z} + a_{m_x m_y m_z+1} + a_{m_x m_y m_z-1})] ; \\ H_p &= \sum_{m_x m_y} \left\{ a_{m_x m_y 0}^+ [\Delta a_{m_x m_y 0} - W a_{m_x m_y 1}] + \right. \\ &+ a_{m_x m_y N_z}^+ [\Delta a_{m_x m_y N_z} - W a_{m_x m_y N_z-1}] - \\ &- W a_{m_x m_y 0}^+ (a_{m_x+1, m_y 0} + a_{m_x-1, m_y 0} + a_{m_x m_y+1, 0} + a_{m_x m_y-1, 0}) - \\ &\left. - W a_{m_x m_y N_z}^+ (a_{m_x+1, m_y N_z} + a_{m_x-1, m_y N_z} + a_{m_x m_y+1, N_z} + a_{m_x m_y-1, N_z}) \right\} . \end{aligned} \quad (3.5)$$

3.1.1 Jednačine kretanja

Pomoću tako prethodno definisanog hamiltonijana, najpre ćemo izračunati jednočestične antikomutatorske Grinove funkcije:

$$G_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z}(t) = \Theta(t) \langle \{a_{n_x n_y n_z}(t), a_{m_x m_y m_z}^+(0)\} \rangle , \quad (3.6)$$

koje određuju ravnotežna svojstva elektrona u tankim kristalnim filmovima (videti Dodatak 5.1).

Elektronske Grinove funkcije se mogu izračunati mikroteorijskom procedurom na sličan način kao što je uradjeno u prethodnoj glavi, s tim što se ovde zbog ograničenosti strukture uvodi delimična prostorna Furije transformacija⁶:

$$G_{n_x n_y n_z; \vec{m}}(t) = \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i[k_x a_x(n_x - m_x) + k_y a_y(n_y - m_y)]} e^{-i\omega t} G_{n_z; m_z}(k_x, k_y; \omega) \quad (3.7)$$

$$\delta_{n_x m_x} \delta_{n_y m_y} \delta_{n_z m_z} = \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} e^{i[k_x a_x(n_x - m_x) + k_y a_y(n_y - m_y)]} \delta_{n_z m_z} ,$$

(gde je: $n_z = 0, 1, 2, \dots, N_z$ i $a_x = a_y = a$), te zamenom gornjih transformacija u jednačinu kretanja (2.24) dobija se sistem jednačina [8-11]:

$$\begin{aligned} \varrho G_0 + G_1 &= \mathcal{K}_0 \\ G_0 + \varrho G_1 + G_2 &= \mathcal{K}_1 \\ G_1 + \varrho G_2 + G_3 &= \mathcal{K}_2 \\ &\cdot \quad \cdot \quad \cdot \\ G_{n_z-1} + \varrho G_{n_z} + G_{n_z+1} &= \mathcal{K}_{n_z} \\ &\cdot \quad \cdot \quad \cdot \\ G_{N_z-3} + \varrho G_{N_z-2} + G_{N_z-1} &= \mathcal{K}_{N_z-2} \\ G_{N_z-2} + \varrho G_{N_z-1} + G_{N_z} &= \mathcal{K}_{N_z-1} \\ G_{N_z-1} + \varrho G_{N_z} &= \mathcal{K}_{N_z} , \end{aligned} \quad (3.8)$$

⁶ Prostorna Furije-transformacija mora biti delimična $(n_x n_y n_z) \rightarrow (k_x, k_y, n_z)$ jer je posmatrani sistem ograničen duž z -pravca.

gde su uvedene oznake:

$$\varrho = \hbar \frac{\omega}{W} - \frac{\Delta}{W} + 2(\cos ak_x + \cos ak_y) ;$$

$$G_{n_z; m_z}(k_x, k_y; \omega) \equiv G_{n_z} ; \quad \mathcal{K}_{n_z} = \frac{i\hbar}{2\pi W} \delta_{n_z, m_z}$$

(indeks m_z je „parazitski” - videti Dodatak 5.1, pa je ovde izbačen).

Ovaj sistem diferencnih algebarskih jednačina sadrži $N_z + 1$ nepoznatih Grinovih funkcija: $G_0, G_1, G_2, \dots, G_{N_z}$. Na osnovu opštih algebarskih stavova, jasno je da se nepoznate mogu izraziti kao:

$$G_{n_z} = \frac{\mathcal{D}_{n_z}}{\mathcal{D}_{N_z+1}} , \quad (3.10)$$

gde \mathcal{D}_{n_z} predstavlja odgovarajuću „zamensku” determinantu, a \mathcal{D}_{N_z+1} - determinantu sistema.

U cilju osnovnog zadatka ovog istraživanja, a to je određivanje elektronskih energija, potrebni su nam polovi Grinovih funkcija (videti Dodatak 5.1), koji se dobijaju kada iste teže beskonačnosti, što znači da mora biti:

$$\mathcal{D}_{N_z+1} \equiv 0 . \quad (3.11)$$

$\mathcal{D}_{N_z+1}(\varrho)$ predstavlja determinantu sistema i može da se napiše u razvijenom obliku:

$$\mathcal{D}_{N_z+1}(\varrho) = \varrho^2 \mathcal{C}_{N_z-1} - 2\varrho \mathcal{C}_{N_z-2} + \mathcal{C}_{N_z-3} , \quad (3.12)$$

gde je \mathcal{C}_{N_z} karakteristični Čebiševljev polinom druge vrste (videti Dodatak 5.3).

3.1.2 Zakon disperzije

Uporedjujući gornju determinantu sa Čebiševljevim polinomima vidi se da je:

$$\mathcal{D}_{N_z+1}(\varrho) = \mathcal{C}_{N_z+1}(\zeta) = \frac{\sin(N_z + 2)\zeta}{\sin \zeta} ; \quad \varrho = 2 \cos \zeta . \quad (3.13)$$

Iz uslova (3.11), tj. za $\mathcal{C}_{N_z+1} \equiv 0$, dobija se:

$$\zeta_\mu = \frac{\pi \mu}{N_z + 2} ; \quad \mu = 1, 2, 3, \dots, N_z + 1 . \quad (3.14)$$

Na osnovu ovoga i jednačine (3.9) nalazimo:

$$\hbar \omega_\mu = \Delta - 2W(\cos ak_x + \cos ak_y - \cos \zeta_\mu) , \quad (3.15)$$

gde je $\cos \zeta_\mu = -\cos ak_z(\nu)$, $\nu = N_z + 2 - \mu$, a

$$k_z(\nu) = \frac{\pi}{a} \frac{\nu}{N_z + 2} ; \quad \nu = 1, 2, 3, \dots, N_z + 1 . \quad (3.16)$$

Zamenom ovih relacija u (3.14) i uzimajući u obzir da je $E_{\vec{k}}(\nu) = \hbar \omega_\nu$ i $\Delta = 6W$, sledi:

$$\mathcal{E}_{\vec{k}}(\nu) \equiv \mathcal{F}_{k_x k_y} + \mathcal{G}_{k_z}(\nu) , \quad (3.17)$$

$$\mathcal{E}_{\vec{k}}(\nu) \equiv \frac{E_{\vec{k}}(\nu)}{4W} ; \quad \mathcal{F}_{k_x k_y} = \sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y}{2} ; \quad \mathcal{G}_{k_z}(\nu) = \sin^2 \frac{ak_z(\nu)}{2} ,$$

Izraz (3.17) predstavlja zakon disperzije slabo vezanih elektrona u filmu (grafički je prikazan na slici 3.1) i ima istu formu kao izraz (2.29) dobijen za idealne neograničene strukture, s razlikom

što je tamo k_z praktično kontinualno promenljivo (u intervalu $[0, \pi/a]$)⁷ kao što su k_x i k_y , a ovde je diskretno - dato izrazom (3.16).

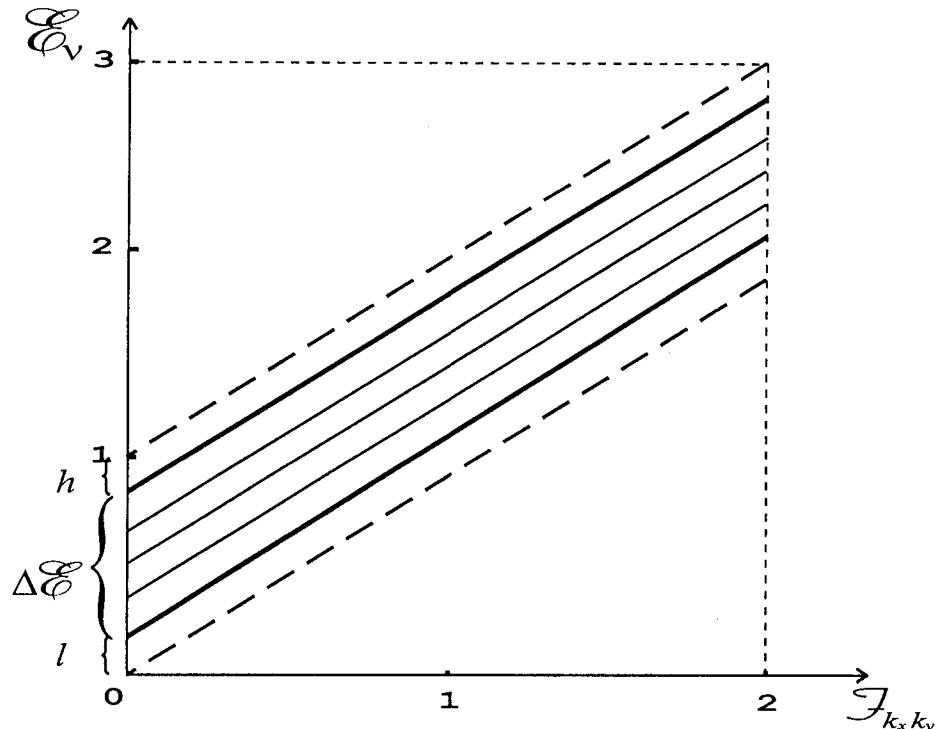
Pored toga, uočava se da je:

$$k_x^{\min} = k_y^{\min} = 0 ; \quad k_z^{\min} = \frac{\pi}{a} \frac{1}{N_z + 2} > 0 , \quad (3.18)$$

pošto je u pitanju tanak film, odnosno: $N_z \ll (N_x, N_y)$ i:

$$k_x^{\max} = k_y^{\max} = \frac{\pi}{a} ; \quad k_z^{\max} = \frac{\pi}{a} \frac{N_z + 1}{N_z + 2} < \frac{\pi}{a} . \quad (3.19)$$

Izmedju minimalne i maksimalne vrednosti za k_z , pa prema tome i za \mathcal{E}_k , postoji još $N_z - 1$ -a diskretna vrednost.



Slika 3.1: Zakon disperzije elektrona u filmu sa primitivnom kubnom rešetkom

Na slici je predstavljen energetski spektar elektrona u petoslojnem kristalnom filmu sa primitivnom kubnom rešetkom. Vidi se da je energetska zona u kristalnom filmu izrazito diskretna (broj diskretnih energetskih stanja je jednak broju slojeva filma) i uža od energetske zone beskonačnog kristala (koja je predstavljena isprekidanim linijama). U skladu sa tim, dolazimo do zaključka da elektronski spektar u tankom filmu poseduje dva energetska gepa, donji l i gornji h :

$$l \equiv \mathcal{E}_f^{\min} - \mathcal{E}_b^{\min} = \frac{1}{4} \left(\frac{\pi}{N_z + 2} \right)^2 = \mathcal{E}_b^{\max} - \mathcal{E}_f^{\max} \equiv h \quad (3.20)$$

(indeks f označava film, a b beskonačnu strukturu). Vidi se da veličine gepova naglo opadaju sa debljinom filma (kvadratna zavisnost). To znači da je njihova praktična egzistencija vezana samo za ultratanke (nano) strukture.

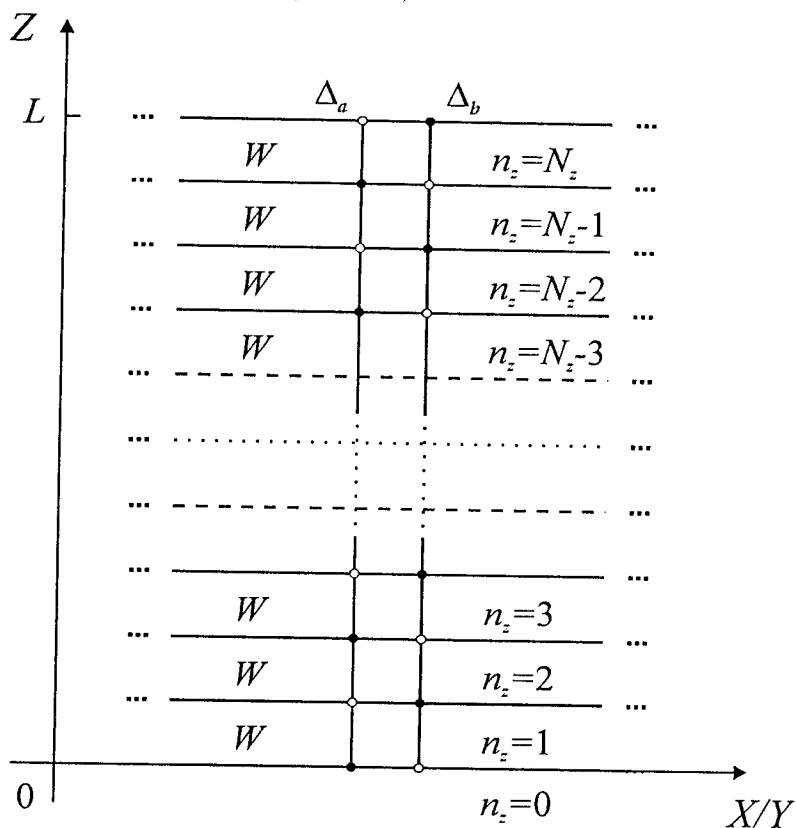
⁷Posmatramo samo „desnu” polovinu spektra ($k_j \geq 0$, $j = x, y, z$) znajući da je on ogledalski simetričan.

3.2 Kristalna film-struktura sa dve podrešetke

Na osnovu prethodnog modela filma formiran je model kristalne film-strukture sa dve podrešetke - tipa $NaCl$. Sličnim postupkom izračunavanja kao za odgovarajuću beskonačnu kristalnu strukturu, ali uz primenu graničnih uslova iz prethodnog poglavlja dođen je zakon disperzije elektrona u filmu sa dve podrešetke.

3.2.1 Model filma sa dve podrešetke

Kao i u prethodnom slučaju, narušenje translacione simetrije duž jednog privilegovanog pravca se uvodi preko indeksa n_z , koji može poprimati vrednosti $n_z = 0, 1, 2, \dots, N_z$, gde $N_z \in [2, 20]$. Dimenzije filma su takve da je on u XY ravnima beskonačan, a u z pravcima ima konačnu debljinu (L). Znači da ovaj film poseduje dve beskonačne granične površine paralelne XY ravnima i to za: $z = 0$ i $z = L$ (slika 3.2).



Slika 3.2: Presek modela kristalne film-strukture tipa $NaCl$

Na ovoj slici je šematski prikazan model kristalne film-strukture sa dve podrešetke. Veličina Δ_a predstavlja energiju elektrona lokalizovanog na čvoru vrste a - beli krugovi, dok je Δ_b energija elektrona na čvoru vrste b - crni krugovi. U skladu sa ovim modelom možemo napisati hamiltonijan posmatrane strukture:

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{m_x m_y} \sum_{m_z=0}^{N_z} a_{m_x m_y m_z}^+ \left[\Delta_{a/b} a_{m_x m_y m_z} - W_x (a_{m_x+1, m_y m_z} + a_{m_x-1, m_y m_z}) - \right. \\
 & \left. - W_y (a_{m_x m_y+1, m_z} + a_{m_x m_y-1, m_z}) - W_z (a_{m_x m_y m_z+1} + a_{m_x m_y m_z-1}) \right]. \quad (3.21)
 \end{aligned}$$

3.2.2 Jednačine kretanja

Za dobijanje jednačina kretanja filma sa dve podrešetke primenjuje se ista procedura izračunavanja kao kod beskonačnog kristala sa dve podrešetke, ali se uvode granični uslovi koji su dati za prethodno posmatrani film, kao i delimična prostorna Furije-transformacija (3.7). Nakon delimične prostorne Furije-transformacije dobijaju se dva sistema jednačina za $2(N_z + 1)$ nepoznatih Grinovih funkcija. Prvi set nepoznatih Grinovih funkcija ($G_0^a, G_1^b, G_2^a, G_3^b, \dots, G_{N_z-1}^a, G_{N_z}^b$) odgovara nizu atoma kod kojeg je atom mase M_a na mestu $n_z = 0$, dok drugi set nepoznatih Grinovih funkcija ($G_0^b, G_1^a, G_2^b, G_3^a, \dots, G_{N_z-1}^b, G_{N_z}^a$) odgovara nizu atoma sa atomom mase M_b na mestu $n_z = 0$.

Prvi set jednacina se dobija u sledećem obliku:

$$\begin{aligned}
\hbar\omega G_{0;m_z}^a &= \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{0;m_z}^a + \Delta_a G_{0;m_z}^a - W_z G_{1;m_z}^b - \\
&- 2(W_x G_{0;m_z}^b \cos a_x k_x + W_y G_{0;m_z}^b \cos a_y k_y) \\
\hbar\omega G_{1;m_z}^b &= \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{1;m_z}^b + \Delta_b G_{1;m_z}^b - W_z (G_{0;m_z}^a - G_{2;m_z}^a) - \\
&- 2(W_x G_{1;m_z}^a \cos a_x k_x + W_y G_{1;m_z}^a \cos a_y k_y) \\
\hbar\omega G_{2j;m_z}^a &= \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{2j;m_z}^a + \Delta_a G_{2j;m_z}^a - W_z (G_{2j-1;m_z}^b + G_{2j+1;m_z}^b) - \\
&- 2G_{2j;m_z}^b (W_x \cos a_x k_x + W_y \cos a_y k_y) \\
\hbar\omega G_{2j+1;m_z}^b &= \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{2j+1;m_z}^b + \Delta_b G_{2j+1;m_z}^b - W_z (G_{2j;m_z}^a + G_{2j+2;m_z}^a) - \\
&- 2G_{2j+1;m_z}^a (W_x \cos a_x k_x + W_y \cos a_y k_y) \\
\hbar\omega G_{N_z-1;m_z}^a &= \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{N_z-1;m_z}^a + \Delta_a G_{N_z-1;m_z}^a - W_z (G_{N_z-2;m_z}^b + G_{N_z;m_z}^b) - \\
&- 2G_{N_z-1;m_z}^b (W_x \cos a_x k_x + W_y \cos a_y k_y) \\
\hbar\omega G_{N_z;m_z}^b &= \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{N_z;m_z}^b + \Delta_b G_{N_z;m_z}^b - W_z G_{N_z-1;m_z}^a - \\
&- 2G_{N_z;m_z}^a (W_x \cos a_x k_x + W_y \cos a_y k_y)
\end{aligned} \tag{3.22}$$

Drugi set jednačina je ekvivalentan prvom. Pri tome se moraju uvesti smene $a \rightleftharpoons b$. Opšti oblik im je onda:

$$\begin{aligned}
\hbar\omega G_{2j;m_z}^b &= \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{2j;m_z}^b + \Delta_b G_{2j;m_z}^b - W_z (G_{2j-1;m_z}^a + G_{2j+1;m_z}^a) - \\
&- 2G_{2j;m_z}^a (W_x \cos a_x k_x + W_y \cos a_y k_y) \\
\hbar\omega G_{2j+1;m_z}^a &= \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{2j+1;m_z}^a + \Delta_a G_{2j+1;m_z}^a - W_z (G_{2j;m_z}^b + G_{2j+2;m_z}^b) - \\
&- 2G_{2j+1;m_z}^b (W_x \cos a_x k_x + W_y \cos a_y k_y)
\end{aligned} \tag{3.23}$$

Uvodeći sledeće skraćene označbe:

$$\varrho = \frac{\hbar\omega}{W_z} - \frac{\Delta_a}{W_z}; \quad R = 2 \frac{W_x \cos a_x k_x + W_y \cos a_y k_y}{W_z}; \tag{3.24}$$

$$S = \varrho + \frac{\Delta_a}{W_z} (1 - \theta); \quad \mathcal{K}_{n_z;m_z}^{a/b} = \frac{i\hbar}{2\pi} \frac{\delta_{n_z;m_z}^{a/b}}{W_z}; \quad \theta = \frac{\Delta_b}{\Delta_a},$$

sistemi jednačina (3.22) i (3.23) se mogu napisati u znatno konciznijoj formi.

Tako da se dobija sledeći sistem jednačina za prvi set nepoznatih Grinovih funkcija:

$$\begin{aligned}
 \varrho G_{0;m_z}^a + G_{1;m_z}^b + RG_{0;m_z}^b &= \mathcal{K}_{0;m_z}^a \\
 G_{0;m_z}^a + SG_{1;m_z}^b + G_{2;m_z}^a + RG_{1;m_z}^a &= \mathcal{K}_{1;m_z}^b \\
 \\
 G_{2j-1;m_z}^b + \varrho G_{2j;m_z}^a + G_{2j+1;m_z}^b + RG_{2j;m_z}^b &= \mathcal{K}_{2j;m_z}^a \\
 G_{2j;m_z}^a + SG_{2j+1;m_z}^b + G_{2j+2;m_z}^a + RG_{2j+1;m_z}^a &= \mathcal{K}_{2j+1;m_z}^b \\
 \\
 G_{N_z-2;m_z}^b + \varrho G_{N_z-1;m_z}^a + G_{N_z;m_z}^b + RG_{N_z-1;m_z}^b &= \mathcal{K}_{N_z-1;m_z}^a \\
 G_{N_z-1;m_z}^a + SG_{N_z;m_z}^b + RG_{N_z;m_z}^a &= \mathcal{K}_{N_z;m_z}^b.
 \end{aligned} \tag{3.25}$$

Drugi set jednačina ekvivalentan je prvom, a u opštoj formi izgleda ovako:

$$\begin{aligned}
 G_{2j-1;m_z}^a + SG_{2j;m_z}^b + G_{2j+1;m_z}^a + RG_{2j;m_z}^a &= \mathcal{K}_{2j;m_z}^b \\
 G_{2j;m_z}^b + \varrho G_{2j+1;m_z}^a + G_{2j+2;m_z}^b + RG_{2j+1;m_z}^b &= \mathcal{K}_{2j+1;m_z}^a.
 \end{aligned} \tag{3.26}$$

U cilju rešavanja osnovnog zadatka ovog rada - određivanja energija elektrona, potrebno je naći polove Grinovih funkcija, čiji realni delovi predstavljaju energije elementarnih ekscitacija sistema. Kako se rešenja sistema jednačina mogu predstaviti u obliku $G = D_G/D$ (gde je D_G odgovarajuća zamenska determinanta), uslov polova se svodi na $D = 0$.

Determinanta sistema jednačina (3.25) i (3.26):

$$D = \begin{vmatrix} \varrho & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & R & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & S & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 & R & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \varrho & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \varrho & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & R & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & S & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & R \\ R & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & S & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & R & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & \varrho & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \varrho & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & R & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & S & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & R & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & \varrho \end{vmatrix}_{2(N_z+1)} \tag{3.27}$$

uvodjenjem sledećih blok-matrica: $\hat{\mathcal{R}}_{(N_z+1)} = R \cdot \hat{I}_{(N_z+1)}$, gde je $\hat{I}_{(N_z+1)}$ jedinična matrica, i

$$\hat{\mathcal{D}}_{(N_z+1)} = \begin{vmatrix} \varrho & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & S & 1 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \varrho & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & S \end{vmatrix} \quad \hat{\mathcal{D}}_{(N_z+1)}^* = \begin{vmatrix} S & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & \varrho & 1 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & S & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \varrho \end{vmatrix} \tag{3.28}$$

se može napisati u sledećem obliku:

$$D = \begin{vmatrix} \hat{\mathcal{D}}_{(N_z+1)} & \hat{\mathcal{R}}_{(N_z+1)} \\ \hat{\mathcal{R}}_{(N_z+1)} & \hat{\mathcal{D}}_{(N_z+1)}^* \end{vmatrix}_{2(N_z+1)}. \quad (3.29)$$

Preuredjivanjem sistema jednačina za nepoznate Grinove funkcije, tako da se navedu prvo jednačine za G^a funkcije, a zatim za G^b funkcije, determinanta sistema napisana preko blok-matrica poprima sledeći oblik:

$$D_{2(N_z+1)} = \begin{vmatrix} \hat{\mathcal{A}}_{(N_z+1)} & \hat{\mathcal{C}}_{(N_z+1)} \\ \hat{\mathcal{C}}_{(N_z+1)} & \hat{\mathcal{B}}_{(N_z+1)} \end{vmatrix}_{2(N_z+1)}, \quad (3.30)$$

gde su pomoćne matrice: $\hat{\mathcal{A}}_{(N_z+1)} = \varrho \cdot \hat{I}_{(N_z+1)}$ i $\hat{\mathcal{B}}_{(N_z+1)} = S \cdot \hat{I}_{(N_z+1)}$, a $\hat{\mathcal{C}}_{(N_z+1)}$ je matrična reprezentacija Čebiševljevog polinoma druge vrste reda $N_z + 1$ (videti Dodatak 5.3):

$$\hat{\mathcal{C}}_{(N_z+1)}(R) = \begin{vmatrix} R & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & R & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & R & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ . & . & . & . & \ddots & . & . & . & . \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & R & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & R & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & R \end{vmatrix}_{(N_z+1)}. \quad (3.31)$$

3.2.3 Zakon disperzije

Uslov da je determinanta sistema jednaka nuli može se u opštem slučaju rešiti samo numerički. Kao primer, navešće se slučaj $\theta = 0.5$ ($\Delta_b = 0.5\Delta_a$) za razne vrednosti debljine (broja slojeva) filma $N_z + 1 \in [3, 10]$, pri čemu je uzeto $\Delta_a = 6W$ i $W_x = W_y = W_z = W$.

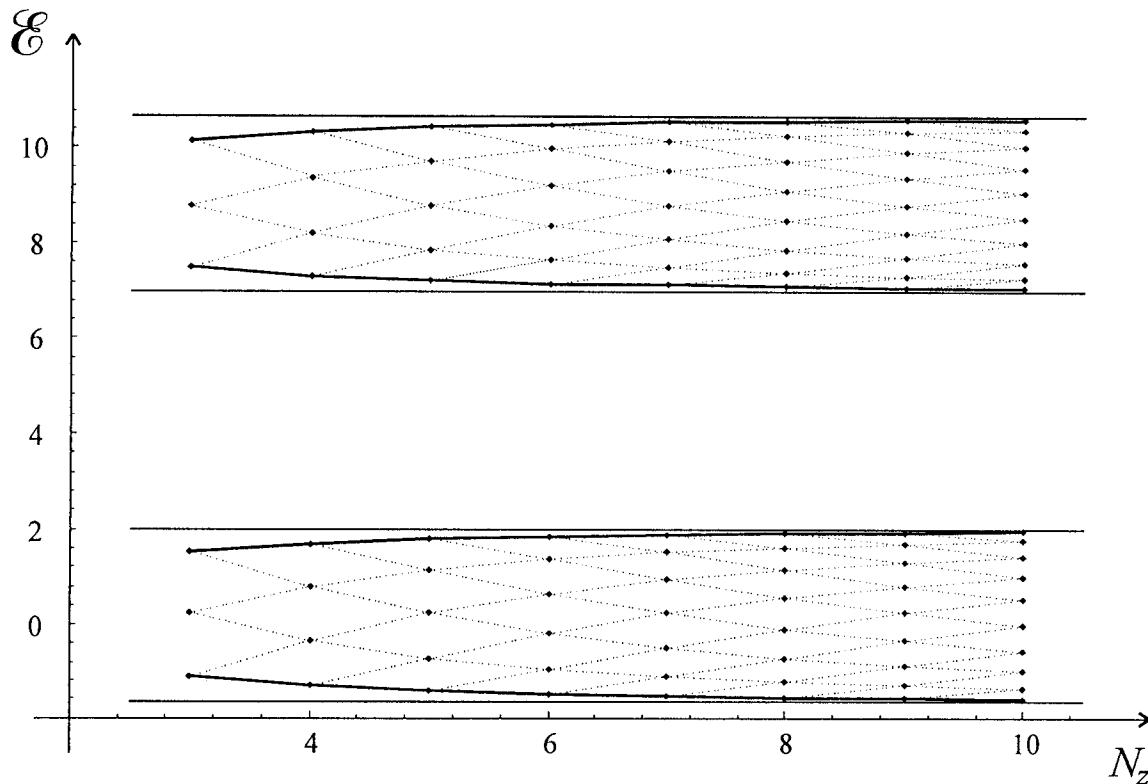
Analiza pokazuje da se, kao i u slučaju kristalnog filma sa primitivnom kubnom rešetkom, javlja konačan broj mogućih frekvencija, tj. energetski spektar elektrona je diskretan. Kao i kod beskonačne strukture, ceo spektar se cepta na dve dozvoljene energetske zone razdvojene zabranjenom zonom, pa je ukupan broj diskretnih stanja $2(N_z + 1)$. Širine dozvoljenih energetskih zona su uže u odnosu na odgovarajući masivan uzorak, odnosno u spektru se pojavljuju energetski gepovi.

Pošto energetski gepovi i širina zabranjene zone imaju znatan uticaj na fizičke osobine posmatranog sistema [6, 8-11], ovde će biti posebno analizirani. U tabeli 3.1 data je ova zavisnost za $\theta = 0.5$ i $k_x = k_y = 0$, pri čemu je uzeto da je $\Delta_a = 6W$. Date su redom najniža i najviša redukovana energija donje dozvoljene energetske zone (\mathcal{E}_{dm} i \mathcal{E}_{dM}) i najniža i najviša redukovana energija gornje zone (\mathcal{E}_{gm} i \mathcal{E}_{gM}), kao i širina zabranjene zone (\mathcal{E}_F), pri čemu je $\mathcal{E} = \hbar\omega/W$.

$N_z + 1$	\mathcal{E}_{dm}	\mathcal{E}_{dM}	\mathcal{E}_{gm}	\mathcal{E}_{gM}	\mathcal{E}_F
3	-1.12	1.51	7.49	10.12	5.98
4	-1.31	1.69	7.31	10.31	5.62
5	-1.43	1.78	7.22	10.43	5.44
6	-1.49	1.84	7.16	10.49	5.32
7	-1.54	1.88	7.12	10.54	5.24
8	-1.57	1.90	7.10	10.57	5.20
9	-1.59	1.92	7.08	10.59	5.16
10	-1.61	1.93	7.07	10.61	5.14
∞	-1.68	2.00	7.00	10.68	5.00

Tabela 3.1: Karakteristične energije u filmu sa dve podrešetke

Korišćenjem podataka iz tabele 3.1, kao i podataka iz izraza (2.36) i (2.37) na slici 3.3 je predstavljena zavisnost veličine energetskih gepova i širine zabranjene zone od debljine posmatranog filma.



Slika 3.3: Zavisnost energetskih gepova i širine zabranjene zone od debljine filma

Uočava se, kao i kod filma sa primitivnom kubnom rešetkom, opadanje vrednosti donjeg i gornjeg energetskog gepa, pri povećanju debljine filma. Fizički značaj postojanja donjeg energetskog gepa je u definisanju energije osnovnog stanja posmatranog sistema. Naime, za veličinu tog gepa se energija osnovnog stanja sistema kvazislobodnih naelektrisanja (degenerisan fermionski gas) u film-strukturama izdiže iznad energije osnovnog stanja istih naelektrisanja, ali u neograničenim kristalima. Za razliku od toga, pojava gornjeg energetskog gepa redefiniše položaj Fermijevog nivoa (spušta ga za vrednost h) ovih naelektrisanja u odnosu na njegovu vrednost kod masivnih uzoraka. Sve to ima za posledicu podizanja kritične temperature superprovodnog prelaza u film-strukturama u odnosu na odgovarajuće masivne uzorke [11]. S obzirom, da se u kristalnoj film-strukturi sa dve podrešetke javljaju po dva donja i dva gornja energetska gepa, može se zaključiti da oni predstavljaju bolje superprovodne materijale od filmova sa primitivnom kubnom rešetkom. Ovo ipak treba da bude predmet posebnih analiza.

Povećanjem debljine filma povećavaju se širine dozvoljenih energetskih zona, dok se širina zabranjene energetske zone smanjuje. Na taj način promenom debljine filma može se menjati širina zabranjene zone, a samim tim uticati na njegove fizičke osobine (što je veoma interesantno sa stanovišta optičkih osobina [6]).

4 Zaključak

U radu su, metodom Grinovih funkcija, analizirani energetski spektri elektrona u idealnim beskonačnim kristalnim strukturama sa primitivnom kubnom rešetkom i strukturama sa dve podrešetke, kao i odgovarajućim (iste kristalne strukture) kristalnim film-strukturama. Na osnovu ovih analiza došlo se do sledećih važnijih rezultata.

1. Energetski spektar elektrona beskonačne kristalne strukture sa dve podrešetke je kontinualan, kao i u slučaju kristala sa primitivnom kubnom rešetkom, ali se cepta na dve dozvoljene energetske zone razdvojene zabranjenom zonom.
2. Usled postojanja granica, energetske zone kod film-struktura su izrazito diskrette i uže nego kod masivnih uzoraka. Broj diskretnih energetske stanja je kod filma sa primitivnom kubnom rešetkom jednak broju slojeva. Kod film strukture sa dve podrešetke taj broj je dvostruko veći, pošto se energetski spektar cepta na dve podzone razdvojene zabranjenom zonom.
3. Najbitnija razlika izmedju beskonačnih i film-struktura, koja se javlja kao isključiva posledica ograničenosti filmova, je postojanje energetskih gepova u elektronskom spektru filmova (elektronski spektri neograničenih kristala ne poseduju gepove). Veličine gepova opadaju sa povećanjem debljine filma, pa je njihova egzistencija vezana samo za ultratanke kristalne strukture.
4. Prisustvo gepova dovodi do povećanja kritične temperature superprovodnog prelaza u odnosu na odgovarajuće masivne uzorke. Kako se u filmu sa dve podrešetke javljaju četiri energetska gepa (dva donja i dva gornja), zabranjena zona je veća, a Fermijev nivo niži, pa oni predstavljaju bolje superprovodne materijale od odgovarajućih masovnih uzoraka.
5. Povećanjem debljine filma smanjuje se širina zabranjene energetske zone u kristalnom filmu sa dve podrešetke. Dakle, promenom broja slojeva može se menjati širina zabranjene zone, a samim tim optičke i druge fizičke osobine ovih sistema.

5 Dodatak

U ovom delu biće date grube osnove teorije linearog odziva i Grinovih funkcija u fizici kondenzovane materije i ključni elementi Čebiševljevih polinoma koji se, kao analitičko rešenje, javljaju u problemu primene metoda Grinovih funkcija. Pored toga biće dat prikaz dobijanja jednačina kretanja za slučaj jednodimenzionog beskonačnog kristala sa dve podrešetke.

5.1 Metod Grinovih funkcija

Poznavanje Grinovih funkcija omogućava nalaženje energije osnovnog stanja sistema, spektra i vrste elementarnih pobudjenja, zatim, termodinamička svojstva u ravnotežnim i neravnotežnim stanjima posmatranog sistema [7,12].

Veoma bitan zadatak statističke fizike je nalaženje srednjih vrednosti dinamičkih veličina. Za veličinu $\hat{A}(x, t)$ srednja vrednost se definiše kao:

$$\langle \hat{A}(x, t) \rangle_t = \text{Sp} \langle \hat{A}(x, t) \hat{\rho}_t \rangle, \quad (5.1)$$

gde je:

$$\hat{\rho}_t = e^{\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}} \hat{S}(t, t_0) e^{-\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}} \quad (5.2)$$

neravnotežni statistički operator, a ρ_0 - ravnotežni statistički operator⁸. Ako se (5.1) zameni u (5.2) i izvrše dve ciklične permutacije operatora, dobija se:

$$\text{Sp} \langle \hat{A}(x, t) \hat{\rho}_t \rangle = \text{Sp} \left\{ \hat{S}^{-1}(t, t_0) e^{-\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}} \hat{A}(x, t) e^{\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}} \hat{S}(t, t_0) \hat{\rho}_0 \right\},$$

tj.:

$$\langle \hat{A}(x, t) \rangle_t = \langle \hat{S}^{-1}(t, t_0) \hat{A}(x, t) \hat{S}(t, t_0) \rangle_0, \quad (5.3)$$

gde je

$$\hat{A}(x, t) = \exp \left(-\frac{H_0 t}{i\hbar} \right) \hat{A}(x, t) \exp \left(\frac{H_0 t}{i\hbar} \right)$$

Šredingerov operator $\hat{A}(x, t)$, napisan u reprezentaciji interakcije. Pisanjem $\langle \dots \rangle_t$ označene su neravnotežne, a $\langle \dots \rangle_0$ ravnotežne srednje vrednosti. $\hat{S}(t, t_0)$ je unitarni operator, tzv. matrica rasejanja:

$$\hat{S}(t, t_0) = \hat{T} \exp \left[\frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{W}(t') \right]. \quad (5.4)$$

Ako se \hat{S} -matrica razvije u red i zadrži na prva dva člana, što odgovara linearnoj aproksimaciji po interakciji $\hat{W}(t)$:

$$\hat{S}^{\pm 1}(t, t_0) = 1 \pm \frac{\hat{T}}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{W}(t'),$$

tada je

$$\langle \hat{A}(x, t) \rangle_t = \langle \hat{A}(x, t) \rangle_0 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \langle \hat{A}(x, t) \hat{T} \hat{W}(t') - \hat{T} \hat{W}(t') \hat{A}(x, t) \rangle_0. \quad (5.5)$$

⁸Za izračunavanje neravnotežnih srednjih vrednosti najpogodnije je koristiti ravnotežni operator velikog kanoničkog ansambla: $\hat{\rho}_0 = e^{(\Omega + \mu \hat{N}_0 - \hat{N}_0)/\theta}$, jer je velika kanonička raspodela najopštija (ona uključuje zakone održanja srednje energije i srednjeg broja čestica).

Kako hronološki operator \hat{T} deluje samo na $\hat{W}(t')$, ne mora se pisati u gornjem izrazu. Izraz ima smisla samo za $t > t'$, pa se ispred proizvoda operatora \hat{A} i \hat{W} uvodi Hevisajdova step funkcija $\Theta(t - t')$, definisana na sledeći način:

$$\Theta(t - t') = \begin{cases} 1 & t > t' \\ 0 & t < t' \end{cases}$$

zbog čega izraz (5.5) prelazi u:

$$\langle \hat{A}(x, t) \rangle_t = \langle \hat{A}(x, t) \rangle_0 + L(t, t_0), \quad (5.6)$$

gde je:

$$L(t, t_0) = \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \Theta(t - t') \langle \hat{A}(x, t) \hat{W}(t') - \hat{W}(t') \hat{A}(x, t) \rangle_0 \quad (5.7)$$

i naziva se linearни odziv ili reakcija sistema na spoljašnju perturbaciju $W(t)$.

Radi dalje analize linearog odziva potrebno je izvršiti konkretizaciju $\hat{W}(t)$. Jedna od opštijih formi hamiltonijana spoljašnje perturbacije je [7,12]:

$$\hat{H}_{int}(t') = \int dx' \hat{B}(x', t') \varepsilon(x', t'), \quad (5.8)$$

pri čemu su $\hat{B}(x', t')$ - operatori neke dinamičke varijable B , a $\varepsilon(x', t')$ - funkcije koje nemaju operatorsku strukturu i ponekad se nazivaju C - brojevima. Kako je:

$$\hat{W}(t) = \exp\left(-\frac{H_0 t}{i\hbar}\right) \hat{H}_{int}(t) \exp\left(\frac{H_0 t}{i\hbar}\right), \quad (5.9)$$

na osnovu (5.8) i (5.9) operator $W(t')$ će biti:

$$\hat{W}(t') = \int dx' \hat{B}(x', t') \varepsilon(x', t'), \quad (5.10)$$

gde je

$$\hat{B}(x', t') = \exp\left(-\frac{H_0 t}{i\hbar}\right) \hat{B}(x', t') \exp\left(\frac{H_0 t}{i\hbar}\right) \quad (5.11)$$

Šredingerov operator napisan u reprezentaciji interakcije. Zamenom (5.10) u (5.7) dobija se:

$$L(t, t_0) = \frac{1}{i\hbar} \int dx' \int_{t_0}^t dt' \varepsilon(x', t') G(x, x'; t, t'), \quad (5.12)$$

gde je veličina:

$$G(x, x'; t, t') \equiv \Theta(t - t') \langle \hat{A}(x, t) \hat{B}(x', t') - \hat{B}(x', t') \hat{A}(x, t) \rangle_0 \quad (5.13)$$

i naziva se dvovremenska temperaturska retardovana funkcija Grina. Ona zavisi od $6N + 2$ -e promenljive (dva puta po tri prostorne i dve vremenske). Ako je prostor homogen (bez defekata, primesa itd.) onda Grinova funkcija, kao njegova fizička karakteristika, ne zavisi od konfiguracionih koordinata x i x' ponaosob, već od njihove razlike $x - x'$, pa se broj promenljivih svodi na $3N + 2$. Ako originalni operatori ne zavise eksplicitno od vremena, tj. $\hat{A}(x, t) \equiv \hat{A}(x)$ i $\hat{B}(x, t) \equiv \hat{B}(x)$ tada Grinova funkcija ne zavisi od vremenskih koordinata t i t' ponaosob, već od njihove razlike $t - t'$ i ukupan broj promenljivih se svodi na $3N + 1$. U tom slučaju Grinova funkcija (5.13) prelazi u:

$$G(x, x'; t, t') \longrightarrow G(x - x', t - t') = \Theta(t - t') [\mathcal{J}_{AB}(x - x', t - t') - \mathcal{J}_{BA}(x - x', t - t')]. \quad (5.14)$$

Ovde su uvedene korelacione funkcije:

$$\mathcal{J}_{AB}(x - x', t - t') = \langle \hat{A}(x, t) \hat{B}(x', t') \rangle_0 ; \quad \mathcal{J}_{BA}(x - x', t - t') = \langle \hat{B}(x', t') \hat{A}(x, t) \rangle_0 \quad (5.15)$$

koje u sebi sadrže svu neophodnu informaciju o svojstvima posmatranog sistema. Upravo iz ovog razloga metod Grinovih funkcija ima izuzetan značaj u teorijskoj fizici kondenzovane materije.

Ako se izvrši simbolička smena: $x \rightarrow \vec{n}$ i $x' \rightarrow \vec{m}$ i postavi uslov $t' = 0$, izraz za Grinovu funkciju može da se napiše u sledećem obliku:

$$G_{\vec{n}\vec{m}}(t) \equiv \langle \langle \hat{A}_{\vec{n}}(t) \mid \hat{B}_{\vec{m}}(0) \rangle \rangle = \Theta(t) \langle [\hat{A}_{\vec{n}}(t), \hat{B}_{\vec{m}}(0)] \rangle_0 . \quad (5.16)$$

Za najrasprostranjeniji način izračunavanja korelacionih funkcija, pa prema tome i svih relevantnih karakteristika sistema, smatra se metod jednačina kretanja za Grinove funkcije [12]:

$$\frac{d}{dt} G_{\vec{n}\vec{m}}(t) = \frac{d}{dt} \Theta(t) \langle [\hat{A}_{\vec{n}}(t), \hat{B}_{\vec{m}}(0)] \rangle_0 + \Theta(t) \langle \left[\frac{d\hat{A}_{\vec{n}}(t)}{dt}, \hat{B}_{\vec{m}}(0) \right] \rangle_0 . \quad (5.17)$$

Korišćenjem Hajzenbergovih jednačina kretanja $i\hbar \frac{d}{dt} \hat{A}(t) = [\hat{A}_{\vec{n}}(t), \hat{H}(t)]$ za operatore fizičkih veličina i osnovnih definicija $\frac{d}{dt} \Theta(t) = \delta(t)$, $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, ovaj izraz se svodi na:

$$i\hbar \frac{d}{dt} G_{\vec{n}\vec{m}}(t) = i\hbar \delta(t) C_{\vec{n}\vec{m}} + \langle \langle [\hat{A}_{\vec{n}}(t), H(t)] \mid \hat{B}_{\vec{m}}(0) \rangle \rangle , \quad (5.18)$$

gde je $C_{\vec{n}\vec{m}}$ korelaciona funkcija, $C_{\vec{n}\vec{m}} \equiv \langle [\hat{A}_{\vec{n}}(t), \hat{B}_{\vec{m}}(0)] \rangle$.

Primenom Furijeove transformacije vreme - frekvencija:

$$G_{\vec{n}\vec{m}}(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega t} G_{\vec{n}\vec{m}}(\omega) \quad (5.19)$$

jednačina (5.18) prelazi u

$$\hbar\omega G_{\vec{n}\vec{m}}(\omega) = \frac{i\hbar}{2\pi} C_{\vec{n}\vec{m}} + \langle \langle [\hat{A}_{\vec{n}}(t), H(t)] \mid \hat{B}_{\vec{m}}(0) \rangle \rangle_\omega . \quad (5.20)$$

Vidi se da se Grinova funkcija $G_{\vec{n}\vec{m}}(\omega) \equiv \langle \langle \hat{A}_{\vec{n}}(t) \mid \hat{B}_{\vec{m}}(0) \rangle \rangle_\omega$ izražava preko nove - više Grinove funkcije $\langle \langle [\hat{A}_{\vec{n}}(t), H(t)] \mid \hat{B}_{\vec{m}}(0) \rangle \rangle_\omega$. Više Grinove funkcije se računaju na isti način kao i obične (pomoću jednačina kretanja), te se tako dobija beskonačan niz, tzv. hijerarhija vezanih jednačina za odredjivanje Grinove funkcije [12]. Da bi se i izračunala tražena jednočestična, a redje dvočestična Grinova funkcija mora se ovaj beskonačan red negde prekinuti korišćenjem neke dovoljno opravdane aproksimacije [7].

Interesantno je još podvući da Grinove funkcije imaju i dublji fizički smisao. Naime, realni delovi njihovih polova predstavljaju energije elementarnih pobudjenja dok recipročne vrednosti imaginarnih delova njihovih polova određuju vremena života tih eksitacija [12].

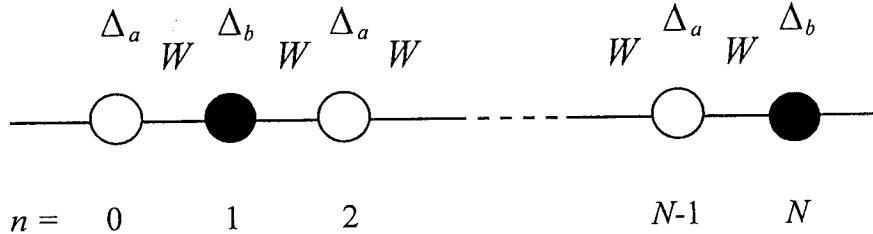
Pored toga, neophodno je dati vezu izmedju ovih Grinovih funkcija i korelacionih funkcija koje, kao što je napred već rečeno, definišu i sve ostale fizičke karakteristike posmatranog sistema. Ova veza se izražava preko spektralne teoreme [7]:

$$\lim_{\delta \rightarrow +0} [G_{\vec{n}\vec{m}}(\omega + i\delta) - G_{\vec{n}\vec{m}}(\omega - i\delta)] = \left(e^{\hbar\omega/\theta} - 1 \right) \mathcal{J}_{BA}^{\vec{n}\vec{m}}(\omega) , \quad (5.21)$$

gde je $\mathcal{J}_{BA}^{\vec{n}\vec{m}}(\omega)$ Furijeov transform korelacione funkcije $\mathcal{J}_{BA}(t)$. Za $t = 0$ korelacione funkcije (5.15) predstavljaju srednje vrednosti proizvoda odgovarajućih operatora.

5.2 Jednodimenzionalni beskonačni kristal sa dve podrešetke

U ovom delu, radi lakšeg razumevanja dobijanja jednačina kretanja za Grinove funkcije kristala sa dve podrešetke, biće analiziran beskonačni jednodimenzionalni kristal (kristalni lanac) sa dve podrešetke (slika 5.1).



Slika 5.1: Kristalni lanac sa dve podrešetke

Analizu ovog kristalnog sistema započinjemo od standardnog elektronskog hamiltonijana [8]:

$$H = \sum_{\nu} \Delta_{\nu} a_{\nu}^+ a_{\nu} - \sum_{\nu, \lambda} W_{\nu, \nu+\lambda} a_{\nu}^+ a_{\nu+\lambda}, \quad (5.22)$$

gde su a_{ν}^+ i a_{ν} operatori kreacije i anihilacije elektrona na čvoru kristalne rešetke ν . Veličina Δ_{ν} predstavlja energiju elektrona lokalizovanog na čvoru ν , a $W_{\nu, \nu+\lambda}$ je energija elektronskog transfera izmedju susednih čvorova rešetke: ν i $\nu + \lambda$ (gde je $\lambda = \pm 1$).

Svojstva posmatranog elektronskog sistema analiziraju se pomoću antikomutatorske Grinove funkcije [7-12]:

$$G_{n,m}(t) = \Theta(t) \langle \{a_n(t), a_m^+(0)\} \rangle, \quad (5.23)$$

koja zadovoljava jednačinu kretanja:

$$i\hbar \frac{d}{dt} G_{n,m}(t) = i\hbar \delta_{nm} \delta(t) + \Theta(t) \langle \{[a_n, H], a_m^+\} \rangle. \quad (5.24)$$

Ubacivanjem hamiltonijana (5.22) komutator iz prethodne jednačine postaje:

$$\hat{C}_n \equiv [a_n, H] = \sum_{\nu} \Delta_{\nu} [a_n, a_{\nu}^+ a_{\nu}] - \sum_{\nu, \lambda} W_{\nu, \nu+\lambda} [a_n, a_{\nu}^+ a_{\nu+\lambda}]. \quad (5.25)$$

Korišćenjem antikomutatorskih relacija (2.23) prelazimo na izračunavanje sabiraka iz prethodnog izraza:

$$\begin{aligned} \hat{C}_1 &\equiv \sum_{\nu} \Delta_{\nu} [a_n, a_{\nu}^+ a_{\nu}] = \sum_{\nu} \Delta_{\nu} (a_{\nu}^+ [a_n, a_{\nu}] + [a_n, a_{\nu}^+] a_{\nu}) = \\ &= \sum_{\nu} \Delta_{\nu} [a_{\nu}^+ (a_n a_{\nu} - a_{\nu} a_n) + (a_n a_{\nu}^+ - a_{\nu}^+ a_n) a_{\nu}] = \\ &= \sum_{\nu} \Delta_{\nu} (-a_{\nu}^+ a_{\nu} a_n + a_n a_{\nu}^+ a_{\nu}) = \sum_{\nu} \Delta_{\nu} (a_{\nu}^+ a_n + a_n a_{\nu}^+) a_{\nu} = \sum_{\nu} \Delta_{\nu} \delta_{n\nu} a_{\nu}. \end{aligned} \quad (5.26)$$

Poznato je da $\delta_{n\nu}$ „skida“ sumu po ν i svako ν prevodi u n [7], tako da se konačno dobija da je $\hat{C}_1 = \Delta_n a_n$. Dalje uzimamo da je:

$$\begin{aligned}\hat{C}_2 &\equiv \sum_{\nu,\lambda} W_{\nu,\nu+\lambda} [a_n, a_\nu^+ a_{\nu+\lambda}] = \sum_{\nu,\lambda} W_{\nu,\nu+\lambda} (a_\nu^+ [a_n, a_{\nu+\lambda}] + [a_n, a_\nu^+] a_{\nu+\lambda}) = \\ &= \sum_{\nu,\lambda} W_{\nu,\nu+\lambda} [a_\nu^+ (a_n a_{\nu+\lambda} - a_{\nu+\lambda} a_n) + (a_n a_\nu^+ - a_\nu^+ a_n) a_{\nu+\lambda}] = \\ &= \sum_{\nu,\lambda} W_{\nu,\nu+\lambda} (2a_\nu^+ a_n a_{\nu+\lambda} + 2a_n a_\nu^+ a_{\nu+\lambda} - \delta_{n\nu} a_{\nu+\lambda}) = \\ &= \sum_{\nu,\lambda} W_{\nu,\nu+\lambda} (2\{a_\nu^+, a_n\} a_{\nu+\lambda} - \delta_{n\nu} a_{\nu+\lambda}) = \sum_{\nu,\lambda} W_{\nu,\nu+\lambda} \delta_{n\nu} a_{\nu+\lambda} = \sum_{\lambda} W_{n,n+\lambda} a_{n+\lambda}.\end{aligned}\quad (5.27)$$

Na osnovu izračunatih komutatora možemo pisati:

$$\Theta(t)\langle \{\hat{C}_1, a_m^+\} \rangle = \Delta_n G_{n,m}; \quad \Theta(t)\langle \{\hat{C}_2, a_m^+\} \rangle = \sum_{\lambda} W_{n,n+\lambda} G_{n+\lambda,m},$$

tako da jednačina kretanja (5.24) postaje:

$$i\hbar \frac{d}{dt} G_{n,m}(t) = i\hbar \delta_{nm} \delta(t) + \Delta_n G_{n,m} - \sum_{\lambda} W_{n,n+\lambda} G_{n+\lambda,m}. \quad (5.28)$$

Ukoliko je n parno tj. $n = 2j$, $j = 0, 1, 2, \dots, N$ tada su $G_{n,m} = G_n^a$, $G_{n+\lambda,m} = G_{n+\lambda}^b$, $\Delta_n = \Delta_a$ i $W_{n,n+\lambda} \equiv W$. U tom slučaju jednačina kretanja je:

$$i\hbar \frac{d}{dt} G_n^a(t) = i\hbar \delta_{nm} \delta(t) + \Delta_a G_n^a - \sum_{\lambda} W G_{n+\lambda}^b. \quad (5.29)$$

Ukoliko je n neparno tj. $n = 2j+1$, $j = 0, 1, 2, \dots, N$ tada su $G_{n,m} = G_n^b$, $G_{n+\lambda,m} = G_{n+\lambda}^a$, $\Delta_n = \Delta_b$ i $W_{n,n+\lambda} \equiv W$. U tom slučaju jednačina kretanja je:

$$i\hbar \frac{d}{dt} G_n^b(t) = i\hbar \delta_{nm} \delta(t) + \Delta_b G_n^b - \sum_{\lambda} W G_{n+\lambda}^a. \quad (5.30)$$

Pošto se radi o translaciono invarijantnoj kristalnoj strukturi prilikom nalaženja zakona disperzije u poglavlju 2.2.2 uzećemo da su Grinove funkcije $G_n^a \equiv G^a$ i $G_n^b \equiv G^b$. Na taj način se nalaženje zakona disperzije svodi na rešavanje sistema jednačina sa dve nepoznate Grinove funkcije G^a i G^b , čiji polovi definišu energije elementarnih ekscitacija u posmatranom sistemu.

5.3 Karakteristični polinomi Čebiševa

Karakteristične determinante oblika:

$$\mathcal{C}_n(x) = \begin{vmatrix} x & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & x & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & x & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \ddots & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & x & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & x & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & x \end{vmatrix}_n \quad (5.31)$$

koje odgovaraju različitim vrednostima, $n = 2, 3, 4, \dots, N$ uz prepostavljene početne uslove:

$$\mathcal{C}_0(x) = 1 ; \quad \mathcal{C}_1(x) = x , \quad (5.32)$$

zadovoljavaju sledeću rekurentnu relaciju⁹:

$$\mathcal{C}_{n+1}(x) = x\mathcal{C}_n(x) - \mathcal{C}_{n-1}(x) \quad (5.33)$$

i nazivaju se Čebiševljevim polinomima druge vrste [8].

Uvodeći smenu: $x = 2 \cos \varphi$, determinanta (5.31) može se analitički transformisati u:

$$\mathcal{C}_n(x) \longrightarrow \mathcal{C}_n(\varphi) = \frac{\sin[(n+1)\varphi]}{\sin(\varphi)} ; \quad \varphi \neq 0 . \quad (5.34)$$

Nule Čebiševljevih polinoma, koje slede iz uslova:

$$\mathcal{C}_n(\varphi) \equiv 0 , \quad (5.35)$$

definisane su relacijom:

$$\varphi_\nu = \frac{\pi}{n+1} \nu ; \quad \nu = 1, 2, 3, \dots, n \quad (5.36)$$

i imaju posebnog fizičkog značaja jer definišu polove (singularitete) Grinovih funkcija, a oni, sa svoje strane, energije elementarnih eksitacija i vreme njihovog života [7,8,12].

⁹Ona predstavlja homogenu diferencnu jednačinu drugog reda sa konstantnim koeficijentima.

6 Literatura

1. D.Raković:
FIZIČKE OSNOVE I KARAKTERISTIKE ELEKTROTEHNIČKIH MATERIJALA,
Elektrotehnički fakultet, Beograd 1995.
2. Z.Ikonić i V.Milanović:
POLUPROVODNIČKE KVANTNE MIKROSTRUKTURE,
Univerzitet u Beogradu, Beograd 1997.
3. S.G.Davison and M.Steslicka:
BASIC THEORY OF SURFACE STATES,
Clarendon, Oxford 1996.
4. I.Supek:
TEORIJSKA FIZIKA I STRUKTURA MATERIJE,
Školska knjiga, Zagreb 1977.
5. W.Jones and N.H.March:
THEORETICAL SOLID STATE PHYSICS,
Dover, New York 1985.
6. A.I.Anseym:
VVEDENIE V TEORIYU POLUPROVODNIKOV,
Nauka, Moskva 1990.
7. B.S.Tošić:
STATISTIČKA FIZIKA,
Institut za fiziku PMF, Novi Sad 1978.
8. S.M.Stojković:
SPEKTRI I STANJA NOSILACA NAELEKTRISANJA I TRANSPORTNE
KARAKTERISTIKE KVAZIVODIMENZIONIH SUPERPROVODNIH MATERIJALA
Elektrotehnički fakultet, Beograd 1997.
9. D.Lj.Mirjanić, S.M.Stojković i J.P.Šetrajčić:
MIKROTEORIJSKI PRILAZ ANALIZI FIZIČKIH VELIČINA
OSOBINA TANKIH SLOJNIH STRUKTURA,
Zbornik radova - 41. ETRAN, 400-403 (1997).
10. J.P.Šetrajčić, S.Lazarev, S.M.Stojković, S.K.Jaćimovski and D.Lj.Mirjanić:
ELECTRON SPECTRA AND STATES OF ULTRATHIN FILMS,
Bul.Stii.Univ. Politehnica Timisoara (Mat.Fiz.) **42**, 50-58 (1997).
11. S.K.Jaćimovski, I.D.Vragović, S.M.Stojković, J.P.Šetrajčić i D.Lj.Mirjanić
SUPERPROVODNE KARAKTERISTIKE TANKIH FILM-STRUKTURA,
Zbornik radova - 1. INDEL, 18-21 (1997).
12. G.Rickayzen:
GREEN'S FUNCTIONS AND CONDENSED MATTER,
Academic Press, London 1980.

UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET
KLJUČNA DOKUMENTACIJSKA INFORMACIJA

- Redni broj:
RBR
- Identifikacioni broj:
IBR
- Tip dokumentacije: *Monografska dokumentacija*
TD
- Tip zapisa: *Tekstualni štampani materijal*
TZ
- Vrsta rada: *Diplomski rad*
VR
- Autor: *Renata Feher, br.dos. 996/91*
AU
- Mentor: *Dr Jovan Šetrajčić, redovni profesor, PMF, Novi Sad*
MN
- Naslov rada: *Elektronski spektri u kristalnoj film-strukturi sa dve podrešetke*
NR
- Jezik publikacije: *Srpski (latinica)*
JP
- Jezik izvoda: *Srpski*
JI
- Zemlja publikovanja: *Jugoslavija*
ZP
- Uže geografsko područje: *Vojvodina*
UGP
- Godina: *1999.*
GO
- Izdavač: *Autorski reprint*
IZ
- Mesto i adresa: *Prirodno-matematički fakultet, Trg Dositeja Obradovića 4, 21000 Novi Sad*
MA
- Fizički opis rada: *(6/30/12/1/6/0/1)*
FO
- Naučna oblast: *Fizika*
NO
- Naučna disciplina: *Fizika čvrstog stanja*
ND
- Predmetna odrednica / ključne reči:
kristalni filmovi, elektroni, Grinove funkcije, spektri, gepovi, zabranjena zona PO
- Čuva se: *Biblioteka Instituta za fiziku, PMF, Novi Sad*
- Izvod: *U radu je primenjen metod Grinovih funkcija za ispitivanje uticaja granica film-struktura sa primitivnom kubnom rešetkom i struktura sa dve podrešetke na energetski spektar i moguća stanja elektrona (elektronski zakon disperzije). Dobijeni rezultati predstavljeni su grafički i izvršene su analize, odnosno poređenja tih rezultata sa odgovarajućim u idealnim beskonačnim strukturama. Na osnovu toga uočene su najbitnije razlike između posmatranih sistema.*
IZ
- Datum prihvatanja teme od strane Veća:
13.09.1999.
DP
- Datum odbrane:
17.09.1999.
DO
- Članovi komisije:
Predsednik:
Dr Ljiljana Mašković,
vanr. profesor, PMF, Novi Sad
Članovi:
Dr Jovan Šetrajčić,
redovni profesor, PMF, Novi Sad
Dr Zoran Mijatović,
docent, PMF, Novi Sad
KO