

UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET
INSTITUT ZA FIZIKU

УЧИВЕРЗИТЕТ У НОВОМ САДУ
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ

ПРИМЉЕНО:	- 6 СЕП 2000
ОРГАНИЗЈЕД	БРОЈ
0603	427/1

- DOKTORSKA DISERTACIJA -

SVOJSTVA SISTEMA NOSILACA NAELEKTRISANJA
U SLOJEVITIM KRISTALNIM STRUKTURAMA

M E N T O R

PROF. DR JOVAN ŠETRAJČIĆ

K A N D I D A T

MR SLADANA STOJKOVIC

Novi Sad, 2000. godine

Discovery consist of seeing what everybody has seen and thinking what nobody has thought.

Albert Szent-Gyorgyi

Zahvalnosti

Koristim priliku da se zahvalim svim onima koji su mi na direktni i/ili indirektni način pomogli da ovu disertaciju uradim.

Najveću zahvalnost dugujem mentoru prof. dr Jovanu Šetrajčiću na nesobičnoj pomoći i stalnoj prijateljskoj podršci tokom izrade ovog rada.

Posebno se zahvaljujem prof.dr Bratislavu Tošiću na mnogobrojnim diskusijama i korisnim sugestijama koje su doprinele završetku ovog obimnog posla.

Zahvaljujem se kolegi mr Igoru Vragoviću na saradnji, kao i koleginicama Iren Junger i Danijeli Šijačić na pomoći prilikom numeričke obrade rezultata i tehničke izrade.

Ovaj rad posvećujem svojoj majci.

Njoj dugujem neizmernu zahvalnost na nesobičnoj pomoći, podršci i razumevanju tokom celokupnog mog školovanja.

Sadržaj

1 Uvod	5
2 Nosioci naelektrisanja u kondenzovanoj materiji	7
2.1 Model kvazislobodnih elektrona	7
2.1.1 Energetske zone	7
2.1.2 Brzina, ubrzanje i efektivna masa	10
2.1.3 Statistika kvazislobodnih nosilaca	12
2.1.4 Toplotna svojstva idealnog i realnog fermionskog sistema	12
2.2 Metode istraživanja energetskog spektra naelektrisanja	14
2.3 Spektri i stanja elektrona u neograničenim kristalima	15
2.3.1 Kristal sa primitivnom kubnom rešetkom	18
2.3.2 Kristalna struktura sa dve podrešetke	18
2.4 Termodinamička svojstva kristala	22
2.4.1 Toplotni kapacitet elektrona	22
2.4.2 Entropija kvazislobodnih elektrona	24
3 Elektroni u tankim filmovima	25
3.1 Spektri i stanja elektrona	26
3.1.1 Kristalna film-struktura sa primitivnom kubnom rešetkom	26
3.1.2 Kristalna film-struktura sa dve podrešetke	43
3.2 Prostorna raspodela elektrona u tankim filmovima	53
3.2.1 Film sa primitivnom kubnom rešetkom	54
3.2.2 Film-struktura sa dve podrešetke	58
3.3 Termodinamika tankih filmova	64
3.3.1 Toplotni kapacitet elektronskog podsistema	64
3.3.2 Elektronski ideo u entropiji	67

4 Elektroni u superrešetkama	69
4.1 Zakon disperzije elektrona u superrešetkama	70
4.1.1 Model proste superrešetke	77
4.1.2 Model $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ superrešetke	83
4.2 Prostorna raspodela elektrona u superrešetkama	88
4.2.1 Spektralne težine proste superrešetke	89
4.2.2 Spektralne težine $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ superrešetke	92
4.3 Termodinamičke osobine superrešetki	96
4.3.1 Toplotni kapacitet elektronskog podsistema	96
4.3.2 Elektronski ideo u entropiji	98
5 Zaključak	100
6 Dodatak: Grinove funkcije i Čebiševljevi polinomi	102
6.1 Metod Grinovih funkcija	102
6.2 Karakteristični polinomi Čebiševa	105
7 Literatura	109

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 [1-6]. Razvoj specijalnih tehnoloških postupaka (epitaksija molekulskim snopom i naparavanje iz metal-organskih jedinjenja) omogućio je izradu tankih slojeva, čije su dimenzijs manje od srednje dužine slobodnog puta nosilaca nanelektrisanja i iznose od nekoliko do nekoliko desetina nanometara [7-9]. Stoga su u ovim slojevima izraženi kvantni efekti u smislu da je kvantomehanički postupak neophodan za opisivanje kretanja elektrona na nivou cele strukture, a ne samo u okviru elementarne ćelije kristala. To dovodi do pojave novih i drugačijih, odnosno izmenjenih osobina materijala (u odnosu na masivne uzorke) i specifičnih pojava što je interesantno ne samo sa fundamentalnog fizičkog stanovišta, već su takve strukture od šireg praktičnog značaja. 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 (optoelektronici, nanoelektronici i visokotemperaturskoj superprovodnosti), što je dalo podstrek proučavanju ovih struktura, kako teorijski tako i eksperimentalno [10-14].

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 [15-23]. Stoga je ispitivanje elektronske strukture i elektronskih osobina niskodimenzionih sistema jedan od udarnih pravaca istraživanja u teorijskoj fizici kondenzovane materije i fizici materijala.

U disertaciji je posebna pažnja posvećena ispitivanju elektronskih spektara i stanja u slojevitim kristalnim strukturama: tankim filmovima¹ i superrešetkama². Na osnovu modela kristalne film-strukture sa primitivnom kubnom rešetkom [24] (sačinjenom od iste vrste atoma), analizirana je kristalna film-struktura sa dve podrešetke - tipa $NaCl$ (sačinjena od dve vrtse naizmenično ponavljujućih atoma). Prilikom analize superrešetki najpre je analiziran uopšteni model superrešetke (izgradjena od niza naizmenično ponavljujućih tankih filmova), a zatim su ti rezultati primenjeni na analizu $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ superrešetke.

Istraženi su uticaji prisustva granica i promenjenih graničnih i energetskih parametara na energetski spektar i moguća stanja elektrona (promene u zakonu disperzije) ovih struktura. Prostorna raspodela elektrona, tj. verovatnoće nalaženja elektrona po slojevima posmatranih sistema, nadjena je izračunavanjem spektralnih težina.

Pomenuta analiza vršena je metodom dvovremenskih temperaturskih Grinovih funkcija³ 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,

¹Filmovi predstavljaju beskonačne strukture u svim kristalnim ravnima paralelnim dvema graničnim površima, koje su normalne na jedan prioritetan pravac, duž koga je posmatrani sistem ograničen [24].

²Ultratanke slojevite strukture tipa $(AC)_m(BC)_n$, koje sadrže naizmenično m slojeva dvokomponentnog jedinjenja AC i n slojeva jedinjenja BC duž specifičnog pravca rasta su tipičan primer superrešetki [25].

³Postoje i drugi metodi pomoću kojih se ovaj problem može tretirati: metod Hajzenbergovih jednačina kretanja, metod malih perturbacija, metod jednočestičnih talasnih funkcija, tzv. metod funkcije gustine stanja (DFT - Density Functional Theory) i sl. [26-32].

ravnotežnih i neravnotežnih svojstava kristala [33-39]. Primenjeni metod je odabran zbog pogodnosti koje nudi definicija polova Grinovih funkcija⁴.

Odabranom metodom najpre su vršena istraživanja na idealnim beskonačnim strukturama, a zatim na kristalnim filmovima i superrešetkama i to zbog toga da bi se na osnovu tih rezultata uočile najbitnije razlike za slojevite strukture. Za film-strukture sa primitivnom kubnom rešetkom je zakon disperzije nadjen analitički (za neke specijalne slučajeve), dok je kod ostalih struktura ispitivan numeričkim metodama⁵. Analizirana je zavisnost energije elektrona od promene veličina graničnih i energetskih parametara. Pokazano je da se variranjem karakterističnih parametara strukture može uticati na transportne i druge fizičke osobine ovih sistema.

Kako zakon disperzije diktira termodinamiku sistema [40-44], prirodno je bilo da se ispitaju osnovne termodinamičke veličine (unutrašnja i slobodna energija), te pomoću njih i osnovne termodinamičke (makroskopske) karakteristike (toplotni kapacitet i entropija) kristalnih filmova i superrešetki i uporede sa istim u neograničenim strukturama. U disertaciji je obuhvaćen samo ideo nanelektrisanja u termodinamičkim osobinama, ali i on, u kristalnim strukturama sa narušenom translacionom invarijantnošću, trpi znatne izmene. Ovo istraživanje je značajno zbog jednostavnog eksperimentalnog merenja pomenutih veličina odakle se dobijaju važne informacije o mikroskopskim stanjima elementarnih pobudjenja, njihovim medju-interakcijama, transportnim mehanizmima i uopšte o termodinamičkim svojstvima.

Zakon disperzije i termodinamičke osobine elektrona najpre su odredjeni za idealne kristale (u glavi 2 ove disertacije), a zatim izračunati i analizirani za tanke filmove (glava 3) i superrešetke (glava 4). U glavi 5 data su zaključna razmatranja i pravci daljeg istraživanja. Teorija Grinovih funkcija i polinomi Čebiševa ukratko su opisani u dodatku.

⁴Realni 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 recipročnim vrednostima vremena života tih ekscitacija. Ovaj metod, iako računski složeniji od uobičajenog prilaza u kome se koristi jednočestična talasna funkcija, daje pored dinamičkih karakteristika (zakon disperzije i sl.) i termodinamičke karakteristike materijala.

⁵Za numeričke analize korišćeni su softverski paketi WINMATH2.2 i WINMATH4.0.

2 Nosioci naelektrisanja u kondenzovanoj materiji

Translaciona invarijantnost idealnih kristalnih struktura [15-23,45,46] 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 [15-18]. 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 uzeti u obzir usrednjeno - uvodjenjem efektivne mase kvazislobodnih nosilaca naelektrisanja. Takođe, zbog specifičnosti kretanja elektrona u kristalnom polju, anomalnog ponašanja kvazislobodnih elektrona na krajevinu valentne zone, uvodi se pojam kvazislobodnih nosilaca naelektrisanja - šupljina [15-18,45].

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 [15-17,19]. 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 doživelu u objašnjenju toplotnog kapaciteta i paramagnete suscepibilnosti 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 nulte do beskonačne:

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

gde je k intezitet talasnog vektora slobodnog elektrona mase m_e . 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: $n\lambda = 2d \sin \vartheta$. Posmatranjem upadnog elektronskog talasa sa pravcem prostiranja normalnim na pomenuće kristalne ravni, za slučaj kubne rešetke ($d = a$, gde je a - parametar rešetke), iz Bragovog uslova dobija se: $\lambda = \frac{2a}{n}$. 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 doživljava prekid, nazivaju se Briluenovim zonom.

Oblast u k -prostoru izmedju $-\frac{\pi}{a}$ i $+\frac{\pi}{a}$ se naziva prvom Briluenovom zonom. Zbog periodičnosti kristala, fizički su neekivalentne 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 [15-19], 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 [15-19] daju diskrete⁶ vrednosti kvazitalasnog vektora unutar prve Briluenove zone:

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

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:

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

rasporedjenih ravnomerno 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.

⁶U slučaju kristala dovoljno velikih dimenzija može se smatrati da je k_i kvazineprekidno [15].

Širina dozvoljene zone se može proceniti pomoću Hajzenbergove relacije neodredjenosti:

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

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 barijere⁷ se procenjuje kao [15-17]:

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

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 energetskih 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 [15,46].

⁷Relativni odnos propuštenog i upadnog elektronskog fluksa.

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 i
- 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 i
- poluprovodnike - kod kojih je širina energetskog procepa manja od 3.5 eV.

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) kvantnomehaničku prirodu [19-22,33].

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 određena 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:

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

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

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

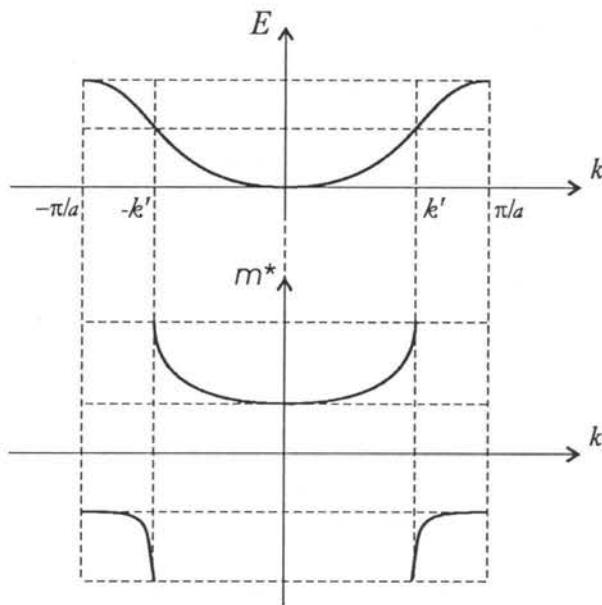
Za ovaku rešetku tenzor recipročne efektivne mase je simetričan i ima medjusobno jednakе dijagonalne komponente. Ukoliko se ta osobina tenzora primeni na izraz (2.13), odnosno (2.1), dobija se zakon disperzije istog oblika kao i kod slobodnog elektrona, ali sa efektivnom masom m^* :

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

Smisao uvodjenja 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 naelektrisanja u kristalnoj rešetki odredjeno je, ne slobodnom elektronskom masom, već skupom veličina (2.14) koje se menjaju pomeranjem elektronskog stanja u prostoru talasnog vektora. Efektivna masa elementarnih nosioca naelektrisanja je pozitivna oko sredine, a negativna pri kraju redukovanih područja, što se može prikazati crtežom (slika 2.1).

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.



Slika 2.1: Promena energije i efektivne mase naelektrisanja u \vec{k} -prostoru

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 oscilatori 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 ($-\pi/a < k < -k'$). Međutim, u toj oblasti faznog k -prostora negativno naelektrisani elektron negativne mase, može da se tretira kao pozitivno naelektrisana 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 naelektrisanja 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 naelektrisanja 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 naelektrisanja i pozitivne mase. Dakle, kretanje elektrona na krajevima zona može da se posmatra i kao kretanje pozitivno naelektrisanih šupljina [15-22].

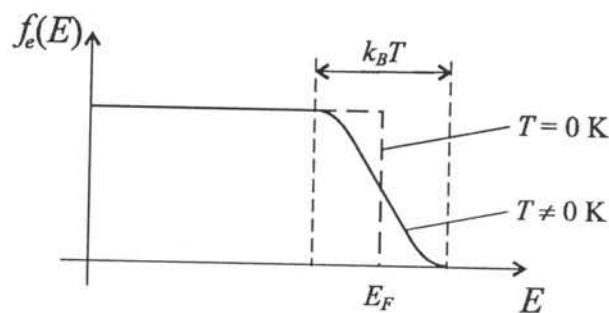
2.1.3 Statistika kvazislobodnih nosilaca

Raspodela elektrona u kristalu po energijama, pri nekoj temperaturi T , pokorava se Fermi-Dirakovoj statistici [15,33]:

$$f_e(E) = \left[\exp\left(\frac{E - E_F}{\theta}\right) + 1 \right]^{-1}, \quad \theta = k_B T, \quad (2.17)$$

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 temeperaturi svi nivoi do nekog odredjenog su popunjeni sa po 2 elektrona, a svi nivoi iznad pomenutog su prazni. Najviši popunjeni 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 2.2: 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 nivoe. 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 2.2). Za sve temperature iznad apsolutne nule uvek važi $f(E_F) = 1/2$.

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

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

2.1.4 Toplotna svojstva idealnog i realnog fermionskog sistema

Elektroni u metalima se mogu, uz grublje aproksimacije, posmatrati kao i elektroni u Fermijevom gasu slobodnih čestica (gas slobodnih neinteragujućih elektrona podvrgnutih Paulijevom principu). Elektroni se tada, kao što je rečeno, podvrgavaju Fermi-Dirakovoj statistici pomoću koje se može izvesti izraz za toplotni kapacitet elektrona idealnog fermionskog sistema.

Polazi se od ukupne energije osnovnog stanja fermionskog gasa [16,22,27]:

$$U_0 = \int f_0 E dN = \frac{3}{5} N \mu_0, \quad (2.18)$$

gde je μ_0 vrednost hemijskog potencijala na absolutnoj nuli, srednja energija će tada biti: $E_0 = (U_0/N) = (3/5)\mu_0$, gde je N ukupan broj čestica gasa. Jednačina stanja odredjena je relacijom $U_0 = \frac{3}{2}P_0V$ odakle je pritisak osnovnog stanja: $P_0 = \frac{2N}{5V}\mu_0$. I u osnovnom stanju sistema fermioni imaju odredjenu kinetičku energiju, a to kretanje se ogleda u pritisku. Obe veličine U_0 i P_0 proporcionalne su graničnoj energiji.

Sa porastom temperature, kao što je pokazano, dolazi do rasplinjavanja Fermijeve funkcije, pa dolazi do povećanja energije pobudjenih fermiona na vrednost [16,19,22,24]:

$$U = U_0 + \Delta U = U_0 + \frac{8N}{3\mu_0}\theta^2 = \frac{3}{5}N\mu_0 \left[1 + \frac{40}{9} \left(\frac{\theta}{\mu_0} \right)^2 \right], \quad (2.19)$$

a pritiska:

$$P = \frac{2}{5}N\mu_0 \left[1 + \frac{40}{9} \left(\frac{\theta}{\mu_0} \right)^2 \right].$$

U području degeneracije ukupna energija i pritisak gase neznatno se menjaju povećanjem temperature. Osnovne vrednosti tih veličina su odredjene doprinosom koji potiče od Paulijevog principa, a temperaturski efekat uzrokuje samo male poravke. Kriterijum za primenu ovih rezultata je $\mu_0 \gg \theta$.

Egzaktan proračun se sprovodi metodom koji je razvio Zomerfeld proračunavajući toplotni kapacitet elektronskog gasa [16]. On nalazi zavisnost hemijskog potencijala od temperature, pomoću koga dobija izraz za unutrašnju energiju energiju fermionskog gasa, a nalazeći izvod unutrašnje energije po temperaturi sledi izraz za toplotni kapacitet fermionskog sistema u obliku

$$C = \frac{\pi^2 k_B^2 N}{2\mu_0} T. \quad (2.20)$$

Pri niskim temperaturama toplotni kapacitet fermiona proporcionalan je temperaturi. Poredjene sa odgovarajućim rezultatom klasične teorije [16,23,27]:

$$C_{kl} = \frac{3}{2}Nk_B \quad (2.21)$$

pokazuje da je u području degeneracije toplotni kapacitet za faktor reda veličine θ/μ_0 manji nego što bi bio prema klasičnoj fizici. Tek kada se gas toliko zagreje da toplotna energija postane mnogo veća od Fermijeve energije, toplotni kapacitet poprima svoju klasičnu vrednost.

Rezultati napred razmotrenog ponašanja idealnog Fermi-Dirakovog degenerisanog gasa, mogu se primeniti na realne fermionske sisteme [17,28]. U toj aproksimaciji, koja je veoma gruba, razmatra se kretanje valentnih elektrona u metalima. Metal se može shvatiti kao „materija” sastavljena od pozitivnih jona i valentnih elektrona, pri čemu joni osciluju oko ravnotežnih položaja, a elektroni se kreću kroz ceo metal. Elektroni su nosioci električne struje pa se i nazivaju provodnim elektronima.

Prva teorija metalnog stanja, koju je razradio Drude (1900.) i usavršio Lorenc (1904.-1905.), se oslanjala na rezultate klasične fizike. Ova teorija je, kao što je pomenuto, pretrpela najveći neuspeh u objašnjenju toplotnog kapaciteta (specifične toplotne) metala. Neka je Z broj valentnih elektrona u atomu. Primenom klasične statistike, iz zakona jednake raspodele energije nalazi se da ZN -elektrona daju doprinos toplotnom kapacitetu $3ZNk_B/2$, što je istog reda veličine kao i doprinos kristalne rešetke. Izgledalo je da elektroni ne učestvuju u prijemu toplotne energije u metalu. Nepojavljivanje tog člana bilo je zagonetno za klasičnu fiziku. Takvo ponašanje elektrona je objasnio Zomerfeld (1928.) koji je prvi primenio Fermi-Dirakovu kvantnu statistiku uz važenje Paulijevog principa i tako zasnovao kvantnu teoriju metalnog stanja [16,22,28].

Prosečna energija toliko je velika da su termička pobudjenja ograničena na neznatan deo elektrona iz okoline Fermijeve energije. U aproksimaciji slobodnih elektrona, toplotni kapacitet [16,19,21] je:

$$C_e = \frac{ZN\pi^2 k_B^2 T}{2\mu_0} . \quad (2.22)$$

Prema Dilon-Ptijevom zakonu toplotni kapacitet jona nezavisan je od temperature:

$$C_i = 3Nk_B . \quad (2.23)$$

Deljenjem (2.22) i (2.23) dobija se:

$$\frac{C_e}{C_i} = \frac{\pi^2 ZT}{6T_F} . \quad (2.24)$$

Temperatura degeneracije (T_F) je u metalima toliko visoka da je elektronski doprinos toplotnom kapacitetu zanemarljivo mali. Izraz (2.23) važi u području dovoljno visokih temperatura. Na niskim temperaturama, toplotni kapacitet kristalne rešetke proporcionalan je trećem stepenu temperature:

$$C_i = \frac{12\pi^4 N k_B}{5} \left(\frac{T}{T_D} \right)^3 , \quad (2.25)$$

T_D - je Debajeva temperatura. Na niskim temperaturama, odnos kapaciteta je:

$$\frac{C_e}{C_i} = \frac{5ZT_D^3}{24\pi^2 T^2 T_F} . \quad (2.26)$$

U neposrednoj blizini absolutne nule u toplotnom kapacitetu metala dominantniji je elektronski doprinos [16].

2.2 Metode istraživanja energetskog spektra naelektrisanja

Pojam „energetski spektar elektrona“ je veoma širok, te ga je potrebno konkretizovati za odredjene slučajeve [15-23]. U opštem smislu, taj termin uključuje informacije o položaju energetskih zona u impulsnom prostoru (zavisnost energetskih termova - granica zona, od pravca kvaziimpulsa, položaj energetskih ekstrema u Briluenovoj zoni i sl.) kao i podatke o zakonu disperzije $E = E_i(\vec{k})$ elektrona u svakoj zoni i . Međutim, postoje dve okolnosti koje suštinski sužavaju obim neophodnih informacija o elektronskim spektrima [47,48].

Prva je Fermi-tečna interakcija medju elektronima. Kao osnovni rezultat Fermi-tečnog razmatranja elektronskog sistema javlja se uvodjenje gase slabo interagujućih elementarnih pobudjenja (kvazičestica), koje opisuju udaljavanje elektronskog sistema od osnovnog nepobudjenog stanja. U osnovnom stanju sva stanja sa energijom manjom od granične energije $E \leq E_F$ su popunjena, a sa energijom $E > E_F$ su slobodna. Funkcija $E(\vec{k}) = E_F$ opisuje površ koja se naziva Fermijeva površ. Prilikom pobudjenja elektronskog sistema, iznad Fermijeve površi javljaju se kvazičestice čije se ponašanje u potpunosti određuje iz oblika Fermijeve površi i zavisnosti njihove energije od kvaziimpulsa. Na taj način, u koncepciji Fermi-tečnosti, elektroni se ponašaju kao elementarne kvazičestice sa dovljno velikim vremenom relaksacije \mathcal{T} samo u uskom sloju, u blizini Fermijeve površi $E(\vec{k}) = E_F$, čija je širina mnogo manja od E_F .

Druga okolnost je slabo dejstvo realno prisutnih spoljašnjih polja na elektronski sistem: električnog, magnetnog i toplotnog. Promena energije elektrona u tim poljima za vreme relaksacije \mathcal{T} praktično je uvek mnogo manja od Fermijeve energije. Zbog toga, za opisivanje širokog spektra električnih, magnetnih, galvanomagnetičnih i toplotnih svojstava metala, dovoljno je poznavati ponašanje elektrona/šupljina (naelektrisanih kvazičestica) koji se nalaze samo oko Fermijeve površi.

Uzimajući u obzir ove dve činjenice, osnovni zadatak istraživanja energetskog spektra elektrona je određivanje oblika izoenergetskih površi $E_i(\vec{k}) = E_{F_i}$ u zonama, čiji skup obrazuje Fermi površ, kao i brzinu elektrona $\vec{v}_F = \frac{1}{\hbar} \text{grad}_k E$ na Fermijevoj površi ($E = E_F$).

Metode istraživanja energetskog spektra elektrona mogu da se podele u tri osnovne grupe.

1. Metode zasnovane na istraživanju kvaziklasičnog kretanja naelektrisanja u električnom i magnetnom polju.
2. Metode koje koriste kvantne efekte povezane sa kvantovanjem spektra naelektrisanja u magnetnom polju.
3. Metode koje se baziraju na interakciji naelektrisanja sa zračenjem.

U prvu grupu spadaju galvanomagnetični efekti u slabim i jakim efektivnim magnetnim poljima, skin-efekat, ciklotronska rezonancija, magnetoplazmeni talasi, fokusiranje elektrona, magnetoakustička (geometrijska) rezonancija Piparda, dimenzioni efekti (delom radiofrekventni efekat Gantmahera). Druga grupa podrazumeva: kvantne oscilatorne efekte (delom efekat Šubnikova-de Gasa i de Gasa-van Alfsena), kvantne dimenzijske efekte, kvantnu ciklotronsku rezonanciju, gigantske oscilacije apsorpcije ultrazvuka. U treću grupu mogu da se ubroje metode anihilacije pozitrona i komptonovsko rasejanje rendgenskih zraka na elektronima u metalima.

Svaki od ovih metoda sadrži kako direktnu tako i indirektnu informaciju o svojstvima naelektrisanja na Fermijevoj površi. Pod direktnom informacijom se podrazumevaju najverovatniji, pouzdani i tačni podaci o spektrima naelektrisanja, koji se dobijaju neposredno iz merenja i bez ikakvih pretpostavki o njihovom zakonu disperzije. Indirektna informacija predstavlja podatke dobijene prilikom obrade eksperimentalnih krivih pomoću različitih teorijskih formula, upotrebljivih samo pri određenim pretpostavljenim modelima i modelnim predstavama o spektru naelektrisanja. Ta informacija je po pravilu manje verovatna i manje tačna, pa joj se mora prilaziti „oprezno“ [47,48].

2.3 Spektri i stanja elektrona u neograničenim kristalima

Ovde su, metodom Grinovih funkcija, razmotrena neka svojstva u idealnim beskonačnim (balk) kristalima sa primitivnom kubnom rešetkom, kao i u neograničenim kristalnim sistemima sa dve podrešetke (struktura tipa $NaCl$). Polazi se od hamiltonijana kvazislobodnih elektrona [21,22] koji u konfiguracionom prostoru i harmonijskoj aproksimaciji ima oblik:

$$H = \sum_{\vec{n}} \Delta_{\vec{n}} a_{\vec{n}}^+ a_{\vec{n}} - \sum_{\vec{n}, \vec{\lambda}} W_{\vec{n}, \vec{n} + \vec{\lambda}} a_{\vec{n}}^+ a_{\vec{n} + \vec{\lambda}}, \quad (2.27)$$

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 hamiltonijan (2.27) ekvivalentan hamiltonijanu elektronskog gasa u aproksimaciji efektivne mase [15,19]:

$$H = \sum_{\vec{k}} E_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}}, \quad E_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2 m^*}. \quad (2.28)$$

Hamiltonijan (2.27) napisan u aproksimaciji najbližih suseda ima oblik:

$$\begin{aligned} H = & \sum_{n_x n_y n_z} \Delta_{n_x n_y n_z} a_{n_x n_y n_z}^+ a_{n_x n_y n_z} - \sum_{n_x n_y n_z} a_{n_x n_y n_z}^+ [W_x (a_{n_x+1, n_y n_z} + a_{n_x-1, n_y n_z}) + \\ & + W_y (a_{n_x n_y+1, n_z} + a_{n_x n_y-1, n_z}) + W_z (a_{n_x n_y n_z+1} + a_{n_x n_y n_z-1})], \end{aligned} \quad (2.29)$$

koji ćemo, zbog pogodnosti, napisati u obliku zbiru:

$$H = H_1 - \sum_{\nu=2}^7 H_\nu , \quad (2.30)$$

$$\begin{aligned} H_1 &= \Delta_{m_x m_y m_z} \sum_{m_x m_y m_z} a_{m_x m_y m_z}^+ a_{m_x m_y m_z} ; & H_2 &= W_x \sum_{m_x m_y m_z} a_{m_x m_y m_z}^+ a_{m_x+1, m_y m_z} \\ H_3 &= W_x \sum_{m_x m_y m_z} a_{m_x m_y m_z}^+ a_{m_x-1, m_y m_z} ; & H_4 &= W_y \sum_{m_x m_y m_z} a_{m_x m_y m_z}^+ a_{m_x m_y+1, m_z} \\ H_5 &= W_y \sum_{m_x m_y m_z} a_{m_x m_y m_z}^+ a_{m_x m_y-1, m_z} ; & H_6 &= W_z \sum_{m_x m_y m_z} a_{m_x m_y m_z}^+ a_{m_x m_y m_z+1} \\ H_7 &= W_z \sum_{m_x m_y m_z} a_{m_x m_y m_z}^+ a_{m_x m_y m_z-1} . \end{aligned}$$

Svojstva posmatranog elektronskog sistema analiziraju se pomoću antikomutatorske jednočestične Grinove funkcije (videti u dodatku 6.1)

$$G_{\vec{n}, \vec{m}}(t) = \Theta(t) \langle \{a_{\vec{n}}(t), a_{\vec{m}}^+(0)\} \rangle , \quad (2.31)$$

koja zadovoljava jednačinu kretanja:

$$i\hbar \frac{d}{dt} G_{\vec{n}, \vec{m}}(t) = i\hbar \delta_{\vec{n}\vec{m}} \delta(t) + \Theta(t) \langle \{[a_{\vec{n}}, H], a_{\vec{m}}^+\} \rangle . \quad (2.32)$$

Drugi deo izraza na desnoj strani ove jednačine kretanja napisaćemo kao:

$$\Theta(t) \langle \{[a_{\vec{n}}, H], a_{\vec{m}}^+\} \rangle = F , \quad (2.33)$$

a komutator:

$$\hat{C} \equiv \hat{C}_{\vec{n}} \equiv [a_{\vec{n}}, H] = \hat{C}_1 - \sum_{\nu=2}^7 \hat{C}_\nu , \quad (2.34)$$

na osnovu čega dobijamo:

$$F \equiv F_{\vec{n}\vec{m}} \equiv \Theta(t) \langle \{\hat{C}, a_{\vec{m}}^+\} \rangle = F_1 - \sum_{\nu=2}^7 F_\nu . \quad (2.35)$$

Za izračunavanje potrebnih komutatora koristićemo standardne fermionske komutatorske relacije [24,33]:

$$\{a_{\vec{n}}, a_{\vec{m}}^+\} = \delta_{\vec{n}\vec{m}} , \quad \{a_{\vec{n}}, a_{\vec{m}}\} = \{a_{\vec{n}}^+, a_{\vec{m}}^+\} = 0 . \quad (2.36)$$

Zatim se može preći na računanje komutatora \hat{C}_ν :

$$\begin{aligned} \hat{C}_1 &= [a_{\vec{n}}, H_1] = \sum_{m_x m_y m_z} \Delta_{m_x m_y m_z} [a_{n_x n_y n_z}, a_{m_x m_y m_z}^+ a_{m_x m_y m_z}] = \\ &= \sum_{m_x m_y m_z} \Delta_{m_x m_y m_z} [a_{m_x m_y m_z}^+ (a_{n_x n_y n_z} a_{m_x m_y m_z} - a_{m_x m_y m_z} a_{n_x n_y n_z})] + \\ &+ \left(a_{n_x n_y n_z} a_{m_x m_y m_z}^+ - a_{m_x m_y m_z}^+ a_{n_x n_y n_z} \right) a_{m_x m_y m_z} \end{aligned} \quad (2.37)$$

Na osnovu relacija (2.36) sledi: $a_{n_x n_y n_z} a_{m_x m_y m_z} = -a_{m_x m_y m_z} a_{n_x n_y n_z}$, i $a_{m_x m_y m_z}^+ a_{n_x n_y n_z} = \delta_{n_x m_x} \delta_{n_y m_y} \delta_{n_z m_z} - a_{n_x n_y n_z} a_{m_x m_y m_z}^+$, pa je:

$$\begin{aligned}\hat{C}_1 &= \sum_{m_x m_y m_z} \Delta_{m_x m_y m_z} \left[a_{m_x m_y m_z}^+ 2a_{n_x n_y n_z} a_{m_x m_y m_z} + \right. \\ &\quad \left. + \left(2a_{n_x n_y n_z} a_{m_x m_y m_z}^+ - \delta_{n_x m_x} \delta_{n_y m_y} \delta_{n_z m_z} \right) a_{m_x m_y m_z} \right] = \\ &= \sum_{m_x m_y m_z} \Delta_{m_x m_y m_z} \left[2 \left(\delta_{n_x m_x} \delta_{n_y m_y} \delta_{n_z m_z} - a_{n_x n_y n_z} a_{m_x m_y m_z}^+ \right) + \right. \\ &\quad \left. + \left(2a_{n_x n_y n_z} a_{m_x m_y m_z}^+ - \delta_{n_x m_x} \delta_{n_y m_y} \delta_{n_z m_z} \right) \right] a_{m_x m_y m_z} = \\ &= \sum_{m_x m_y m_z} \Delta_{m_x m_y m_z} a_{m_x m_y m_z} \delta_{n_x m_x} \delta_{n_y m_y} \delta_{n_z m_z}.\end{aligned}$$

Poznato je da $\delta_{\vec{n}\vec{m}}$ „skida“ suinu po $\vec{m} \equiv (m_x, m_y, m_z)$ i svako $m_j \rightarrow n_j$, ($j = x, y, z$), te se konačno dobija: $\hat{C}_1 = \Delta_{n_x n_y n_z} a_{n_x n_y n_z}$. Na osnovu toga i (2.33) sledi

$$F_1 = \Theta(t) \langle \{\hat{C}_1, a_{\vec{m}}^+\} \rangle = \Delta_{\vec{n}} \Theta(t) \langle \{a_{\vec{n}}, a_{\vec{m}}^+\} \rangle = \Delta_{\vec{n}} G_{\vec{n}\vec{m}}(t),$$

gde izraz: $\Theta(t) \langle \{a_{\vec{n}}, a_{\vec{m}}^+\} \rangle$ predstavlja polaznu Grinovu funkciju $G_{\vec{n}\vec{m}}(t)$. Analognim računanjem kao za \hat{C}_1 , dobijaju se i ostale vrednosti komutatora \hat{C}_ν , pomoću koji mogu da se napišu izrazi za svako F_ν iz jednačine (2.33), odnosno (2.35). Njihovom zamenom u jednačinu kretanja (2.32) dobija se:

$$\begin{aligned}i\hbar \frac{d}{dt} G_{\vec{n},\vec{m}}(t) &= i\hbar \delta_{\vec{n}\vec{m}} \delta(t) + \Delta_{\vec{n}} G_{\vec{n},\vec{m}}(t) - \\ &- \left[W_x \left(G_{n_x+1,n_y n_z;\vec{m}}(t) + G_{n_x-1,n_y n_z;\vec{m}}(t) \right) + W_y \left(G_{n_x n_y+1,n_z;\vec{m}}(t) + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + G_{n_x n_y-1,n_z;\vec{m}}(t) \right) + W_z \left(G_{n_x n_y n_z+1;\vec{m}}(t) + G_{n_x n_y n_z-1;\vec{m}}(t) \right) \right].\end{aligned}\quad (2.38)$$

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

$$G_{\vec{n},\vec{m}}(t) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega G_{\vec{k}}(\omega) e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})-i\omega t}, \quad (2.39)$$

$$\delta_{\vec{n}\vec{m}} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})}; \quad \delta(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega t}, \quad (2.40)$$

gde je $N \equiv N_x N_y N_z$ - ukupan broj elektrona u kristalu. Ako se još izraz (2.39) diferencira po t :

$$\frac{d}{dt} G_{\vec{n},\vec{m}}(t) = -i \frac{\omega}{N} \sum_{\vec{k}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega G_{\vec{k}}(\omega) e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})-i\omega t}, \quad (2.41)$$

a zatim sve to zameni u jednačinu (2.38) dobija se:

$$\begin{aligned}\frac{1}{2\pi N} \sum_{\vec{k}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})-i\omega t} &\left\{ -i\hbar + 2\pi \left[\hbar\omega - \Delta_{\vec{n}} + W_x \left(e^{+iak_x} + e^{-iak_x} \right) + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + W_y \left(e^{+iak_y} + e^{-iak_y} \right) + W_z \left(e^{+iak_z} + e^{-iak_z} \right) \right] G_{\vec{k}}(\omega) \right\} = 0.\end{aligned}\quad (2.42)$$

2.3.1 Kristal sa primitivnom kubnom rešetkom

U ovom slučaju uzimamo da je $\Delta_{\vec{n}} = \Delta$ i $W_x = W_y = W_z = W$ (što je opravdano s obzirom da je u pitanju translaciono invarijamtna struktura), pa se direktno iz jednačine (2.42) dobija:

$$[\hbar\omega - \Delta + 2W(\cos ak_x + \cos ak_y + \cos ak_z)] G_{\vec{k}}(\omega) = \frac{i\hbar}{2\pi}, \quad (2.43)$$

odakle dalje sledi izraz za Grinovu funkciju:

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

Nalaženjem polova Grinove funkcije dobija se izraz:

$$E_{\vec{k}} = \hbar \omega_{\vec{k}} = \Delta - 2W(\cos ak_x + \cos ak_y + \cos ak_z) \quad (2.44)$$

koji predstavlja zakon disperzije vezanih elektrona [15-24]. Zakon disperzije slabo vezanih elektrona (degenerisan elektronski gas), kada je $\Delta = 6W$ [21], svodi se na oblik:

$$E_{\vec{k}} = 4W \left(\sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y}{2} + \sin^2 \frac{ak_z}{2} \right). \quad (2.45)$$

Ako se uzme u obzir da je za male talasne vektore: $\frac{ak_j}{2} \ll 1 \Rightarrow \sin \frac{ak_j}{2} \approx \frac{ak_j}{2}$, tada prethodni izraz dobija oblik:

$$E_{\vec{k}} \approx Wa^2 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \equiv Wa^2 k^2. \quad (2.46)$$

Na osnovu (2.28) i (2.46) sledi: $Wa^2 k^2 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$, odnosno $\frac{1}{m^*} = \frac{2a^2 W}{\hbar^2}$. Poslednji izraz predstavlja recipročnu vrednost efektivne mase u dugotalasnoj aproksimaciji, što zbog njenog tenzorskog karaktera možemo zapisati kao:

$$\frac{1}{m^*} = \frac{2a^2 W}{\hbar^2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.47)$$

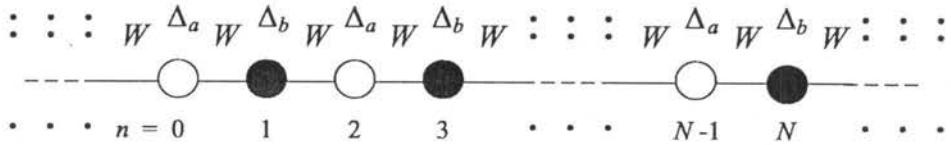
Zakon disperzije slabo vezanih elektrona (2.45) možemo napisati u sledećem obliku:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{\vec{k}} \equiv \frac{E_{\vec{k}}}{4W} &= \mathcal{F}_{k_x k_y} + \mathcal{G}_{k_z}, \\ \mathcal{F}_{k_x k_y} &= \sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y}{2}; \quad \mathcal{G}_{k_z} = \sin^2 \frac{ak_z}{2}, \end{aligned} \quad (2.48)$$

koji će nam biti pogodniji zbog kasnije komparacije sa zakonom disperzije elektrona u film-strukturama.

2.3.2 Kristalna struktura sa dve podrešetke

Da bi se analizirala beskonačna kristalna struktura sa podrešetkom, prvo se posmatra sastavni motiv (beskonačni jednodimenzionalni lanac - na slici 2.3) čijim se naizmeničnim redjanjem u sva tri pravca ustvari dobija masivni kristal.



Slika 2.3: Kristalni lanac sa dve podrešetke

Analiza ovog kristalnog sistema započinje od hamiltonijana (2.27) napisanog u obliku:

$$H = \sum_{\nu} \Delta_{\nu} a_{\nu}^+ a_{\nu} - \sum_{\nu, \lambda} W_{\nu, \nu+\lambda} a_{\nu}^+ a_{\nu+\lambda}, \quad (2.49)$$

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 $\lambda = \pm 1$).

Pošto je u pitanju jednodimenzional lanac, Grinove funkcije (2.31) zapisujemo kao:

$$G_{n,m}(t) = \Theta(t) \langle \{a_n(t), a_m^+(0)\} \rangle, \quad (2.50)$$

a jednačinu kretanja:

$$i\hbar \frac{d}{dt} G_{n,m}(t) = i\hbar \delta_{nm} \delta(t) + \Theta(t) \langle [a_n, H], a_m^+ \rangle. \quad (2.51)$$

Ubacivanjem hamiltonijana (2.49), komutator iz prethodne jednačine postaje:

$$\hat{C}_n \equiv [a_n, H] = \sum_{\nu} \Delta_{\nu} [a_n, a_{\nu}^+ a_{\nu}] - \sum_{\nu, \lambda} W_{\nu, \nu+\lambda} [a_n, a_{\nu}^+ a_{\nu+\lambda}]. \quad (2.52)$$

Korišćenjem antikomutatorskih relacija (2.36) izračunavaju se sabirci iz prethodnog izraza:

$$\begin{aligned} \hat{C}_1 &\equiv \sum_{\nu} \Delta_{\nu} [a_n, a_{\nu}^+ a_{\nu}] = \sum_{\nu} \Delta_{\nu} (a_{\nu}^+ [a_n, a_{\nu}] + [a_n, a_{\nu}^+] a_{\nu}) = \\ &= \sum_{\nu} \Delta_{\nu} [a_{\nu}^+ (a_n a_{\nu} - a_{\nu} a_n) + (a_n a_{\nu}^+ - a_{\nu}^+ a_n) a_{\nu}] = \\ &= \sum_{\nu} \Delta_{\nu} (-a_{\nu}^+ a_{\nu} a_n + a_n a_{\nu}^+ a_{\nu}) = \sum_{\nu} \Delta_{\nu} (a_{\nu}^+ a_n + a_n a_{\nu}^+) a_{\nu} = \sum_{\nu} \Delta_{\nu} \delta_{n\nu} a_{\nu}. \end{aligned} \quad (2.53)$$

Nakon „skidanja“ sume po ν i prevodjenja svakog ν u n , konačno se dobija da je $\hat{C}_1 = \Delta_n a_n$. Analognim postupkom se izračunava i \hat{C}_2 .

$$\begin{aligned} \hat{C}_2 &\equiv \sum_{\nu, \lambda} W_{\nu, \nu+\lambda} [a_n, a_{\nu}^+ a_{\nu+\lambda}] = \sum_{\nu, \lambda} W_{\nu, \nu+\lambda} (a_{\nu}^+ [a_n, a_{\nu+\lambda}] + [a_n, a_{\nu}^+] a_{\nu+\lambda}) = \\ &= \sum_{\nu, \lambda} W_{\nu, \nu+\lambda} [a_{\nu}^+ (a_n a_{\nu+\lambda} - a_{\nu+\lambda} a_n) + (a_n a_{\nu}^+ - a_{\nu}^+ a_n) a_{\nu+\lambda}] = \\ &= \sum_{\nu, \lambda} W_{\nu, \nu+\lambda} (2a_{\nu}^+ a_n a_{\nu+\lambda} + 2a_n a_{\nu}^+ a_{\nu+\lambda} - \delta_{n\lambda} a_{\nu+\lambda}) = \\ &= \sum_{\nu, \lambda} W_{\nu, \nu+\lambda} (2\{a_{\nu}^+, a_n\} a_{\nu+\lambda} - \delta_{n\lambda} a_{\nu+\lambda}) = \sum_{\nu, \lambda} W_{\nu, \nu+\lambda} \delta_{n\lambda} a_{\nu+\lambda} = \sum_{\lambda} W_{n, n+\lambda} a_{n+\lambda}. \end{aligned} \quad (2.54)$$

Na osnovu izračunatih komutatora dobija se:

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

tako da jednačina kretanja (2.51) postaje:

$$i\hbar \frac{d}{dt} G_{n,m}(t) = i\hbar \delta_{nm} \delta(t) + \Delta_n G_{n,m} - \sum_{\lambda} W_{n,n+\lambda} G_{n+\lambda,m}. \quad (2.55)$$

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:

$$i\hbar \frac{d}{dt} G_n^a(t) = i\hbar \delta_{nm} \delta(t) + \Delta_a G_n^a - \sum_{\lambda} W G_{n+\lambda}^b. \quad (2.56)$$

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:

$$i\hbar \frac{d}{dt} G_n^b(t) = i\hbar \delta_{nm} \delta(t) + \Delta_b G_n^b - \sum_{\lambda} W G_{n+\lambda}^a. \quad (2.57)$$

U beskonačnoj kristalnoj strukturi sa podrešetkom 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 (2.32) se, prema tome, deli na dve jednačine kretanja za dve Grinove funkcije, koje posle Furije-transformacija (2.39) i (2.40), dobijaju oblik:

$$\hbar\omega G_{\vec{k}}^a(\omega) = \frac{i\hbar}{2\pi} + \Delta_a G_{\vec{k}}^a(\omega) - 2G_{\vec{k}}^b(\omega)(W_x \cos a_x k_x + W_y \cos a_y k_y + W_z \cos a_z k_z), \quad (2.58)$$

$$\hbar\omega G_{\vec{k}}^b(\omega) = \frac{i\hbar}{2\pi} + \Delta_b G_{\vec{k}}^b(\omega) - 2G_{\vec{k}}^a(\omega)(W_x \cos a_x k_x + W_y \cos a_y k_y + W_z \cos a_z k_z). \quad (2.59)$$

Pošto se radi o translaciono invarijantnoj kristalnoj strukturi za nalaženja zakona disperzije može se uzeti 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 (u (ω, \vec{k}) prostoru [33]) definišu energije elementarnih ekscitacija u posmatranom sistemu.

Kako se rešenja gornjeg sistema jednačina mogu napisati kao $\frac{D_G^{a/b}}{D}$, gde su $D_G^{a/b}$ determinanta promenljive, a D determinanta sistema, uslov za nalaženje polova Grinovih funkcija se svodi na izračunavanje nula determinante posmatranog sistema jednačina:

$$D = \begin{vmatrix} \hbar\omega - \Delta_a & 2(W_x \cos a_x k_x + \\ & + W_y \cos a_y k_y + W_z \cos a_z k_z) \\ 2(W_x \cos a_x k_x + & \hbar\omega - \Delta_b \\ + W_y \cos a_y k_y + W_z \cos a_z k_z) & \end{vmatrix} = 0 \quad (2.60)$$

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

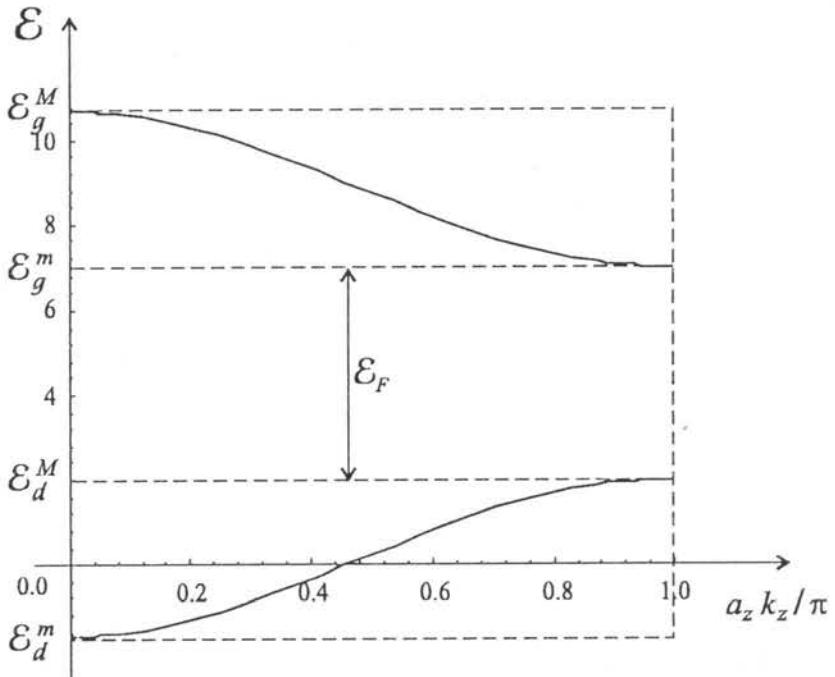
$$E^2 - E(\Delta_a + \Delta_b) + \Delta_a \Delta_b - 4 \left(\sum_{i=x,y,z} W_i \cos a_i k_i \right)^2 = 0, \quad (2.61)$$

čija su rešenja:

$$E = \frac{\Delta_a + \Delta_b}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(\Delta_a - \Delta_b)^2 + 16 \left(\sum_{i=x,y,z} W_i \cos a_i k_i \right)^2}. \quad (2.62)$$

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

$$E = (1 + \chi) \frac{\Delta_a}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(1 - \chi)^2 \Delta_a^2 + 16 \left(\sum_{i=x,y,z} W_i \cos a_i k_i \right)^2}. \quad (2.63)$$



Slika 2.4: Zakon disperzije elektrona beskonačne kristalne strukture tipa $NaCl$

Na slici 2.4 predstavljen je zakon disperzije elektrona u beskonačnom kristalu sa dve podrešetke za $k_x = k_y = 0$, $\Delta_a = 6W$ i $\chi = 0.5$, pri čemu je uzeto da je $W_x = W_y = W_z = W$. Energetska zona kristalne strukture sa podrešetkom 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 ($E \equiv \hbar\omega/W$) za ovaj sistem izračunate su iz jednačine (2.63) uzimajući $k_x = k_y = 0$ i $k_z = 0$ (za E_d^m i E_g^M), kao i $k_z = \pi$ (za E_d^M i E_g^m). Na taj način se dobija:

$$E_d^m = -1.68; \quad E_d^M = 2.00; \quad E_g^m = 7.00; \quad E_g^M = 10.68, \quad (2.64)$$

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

$$E_F = E_g^m - E_d^M = 5.00. \quad (2.65)$$

2.4 Termodinamička svojstva kristala

Zbog visoke gustine gas valentnih elektrona u metalima se bitno razlikuje od klasičnog gasa. Napred su delimično razmatrana svojstva degenerisanog gasa slobodnih fermiona, što se može uopštiti uzimajući u obzir delovanje periodičnog polja kristalne rešetke koje menja gustinu stanja valentnih elektrona. Za razliku od slobodnih elektrona gustina stanja u periodičnom potencijalu ne mora biti proporcionalna kvadratnom korenu iz elektronske energije. Na osnovu dobijenog zakona disperzije (2.45) odnosno (2.46), ovde ćemo izvesti izraz za topotni kapacitet i entropiju elektrona u idealnom kristalu sa primitivnom kubnom rešetkom.

2.4.1 Topotni kapacitet elektrona

Fermi-Dirakova raspodela (2.17) može da se iskoristi za analizu termodinamičkih osobina sistema slobodnih elektrona na niskim temperaturama [33]. Polazi se od standardnog izraza za unutrašnju energiju elektronskog gasa [16,40-44]:

$$U = \sum_{\vec{k}} E(\vec{k}) \left\{ e^{[E(\vec{k}) - \mu]/\theta} + 1 \right\}^{-1}. \quad (2.66)$$

Kako se energija elektrona u zoni menja praktično kontinualno, sumacioni izraz za unutrašnju energiju može da se prevede u integral po talasnom vektoru⁸:

$$\sum_{\vec{k}} \rightarrow \frac{N_x N_y N_z a^3}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \vartheta \, d\vartheta \int_0^{k_F} k^2 \, dk.$$

Zamenom prethodnog izraza u (2.66) i prevodenjem u integral po $E(\vec{k})$ pomoću zakona disperzije u dugotalasnoj aproksimaciji (2.46), dobija se:

$$U = \frac{1}{4} \frac{N_x N_y N_z}{\pi^2 W^{3/2}} \int_0^{E_F} \frac{E^{3/2}}{1 + e^{(E-\mu)/\theta}} \, dE.$$

Uvodjenjem smena $\tau = E/\theta$ i $\eta = \mu/\theta$, sledi:

$$U = \frac{1}{4} \frac{N_x N_y N_z}{\pi^2 W^{3/2}} \theta^{5/2} \int_0^{E_F/\theta} \frac{\tau^{3/2}}{1 + e^{\tau-\eta}} \, d\tau.$$

Uzimajući u obzir da se radi o niskim temperaturama, gornja granica integrala može da se zameni sa $+\infty$ jer je $E_F \gg \theta$ [16]. Zbog toga posle smene $\xi = \tau - \eta$ i nakon parcijalne integracije gornji izraz prelazi u:

$$U = -\frac{1}{10} \frac{N_x N_y N_z}{\pi^2 W^{3/2}} \theta^{5/2} \int_{-\eta}^{\infty} (\xi + \eta)^{5/2} \frac{d}{d\xi} \frac{1}{1 + e^\xi} \, d\xi. \quad (2.67)$$

Na apsolutnoj nuli negativni izvod Fermijeve funkcije jednak je singularnoj δ -funkciji [16,28]. To ponašanje ostaje kvalitativno sačuvano u celom području degeneracije. Drugim rečima, funkcija $1/(1 + e^\xi)$ se menja samo u okolini nule. Zbog toga se prvi faktor u prethodnom integralu može razviti u red oko $\xi = 0$: $(\xi + \eta)^{5/2} = \eta^{5/2} + \frac{5}{2}\xi\eta^{3/2} + \frac{15}{8}\xi^2\eta^{1/2} + \dots$ [16,49].

⁸Uvode se sferne koordinate zbog sferne simetrije ovog problema.

Po pretpostavci η je veliki broj⁹, a kako doprinosi integralu u području velikih apsolutnih vrednosti promenljive ξ eksponencijalno opadaju [16], to se donja granica integrala može zamjeniti sa $-\infty$, jer je greška uzrokovana tom aproksimacijom zanemarljivo mala. Članovi u prethodnom razvoju sa neparnim eksponentom od ξ ne doprinose integralu, a izvod Fermijeve funkcije ne menja se zamenom $\xi \rightarrow -\xi$. Razmatranje se ograničava na kvadratne članove po temperaturi - viši doprinosi se zanemaruju [16,43]. Na taj način, imajući u vidu da integral tipa

$$I_{2n} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{x^{2n} e^x}{(e^x + 1)^2} dx, \quad (2.68)$$

za $n = 1$, ima vrednost $I_2 = \frac{\pi^2}{3}$ [49,50], dobija se da je negativna vrednost integrala I iz izraza (2.68): $I = \eta^{5/2} \left(1 + \frac{5\pi^2}{8\eta^2} \right)$, odakle zamenom u (2.67) sledi:

$$U = \frac{1}{10} \frac{N_x N_y N_z}{\pi^2 W^{3/2}} \mu^{5/2} \left[1 + \frac{5\pi^2}{8} \left(\frac{\theta}{\mu} \right)^2 \right]. \quad (2.69)$$

Iz uslova jednakosti ukupnog broja elektrona i mogućeg broja njihovih stanja:

$$N = \frac{2}{3} \left(\frac{\partial U}{\partial \mu} \right)_\theta, \quad (2.70)$$

($N = N_x N_y N_z$), te nalaženjem odgovarajućeg izvoda dobija se:

$$\mu_0^{3/2} = \mu_b^{3/2} \left[1 + \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{\theta}{\mu_b} \right)^2 \right],$$

gde je $\mu_0 \equiv \mu_{b0} = (6\pi^2 W^{3/2})^{2/3}$ - vrednost hemijskog potencijala¹⁰ na $\theta = 0$. U saglasnosti sa već učinjenim aproksimacijama, ovu jednačinu treba rešiti isključivo do kvadratnih članova po temperaturi, što vodi do izraza:

$$\mu_b = \mu_{b0} \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{\theta}{\mu_{b0}} \right)^2 \right], \quad (2.71)$$

koji pokazuje zavisnost hemijskog potencijala od temperature.

Zamenom (2.71) u (2.69) dobija se izraz za unutrašnju energiju elektrona idealne strukture:

$$U_b = \frac{3}{5} N \mu_{b0} \left[1 + \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{\theta}{\mu_{b0}} \right)^2 \right]. \quad (2.72)$$

Prema [16,21]:

$$C = \frac{k_B}{N} \frac{\partial U}{\partial \theta}, \quad (2.73)$$

sledi:

$$C_b = \frac{k_B \pi^2 \theta}{2 \mu_{b0}}. \quad (2.74)$$

Ovaj izraz predstavlja toplotni kapacitet elektrona po jednom atomu¹¹ u idealnom kristalu, odakle se vidi da je on linearno proporcionalan temperaturi.

⁹Radi se o niskim temperaturama.

¹⁰Indeks b - upotrebljen je da bi se istakli „balkovski“ rezultati, koje ćemo kasnije porediti sa rezultatima za slojevite strukture.

¹¹Predpostavlja se da se ima jedan elektron po elementarnoj čeliji (primitivna čelija i razredjen elektronski gas).

2.4.2 Entropija kvazislobodnih elektrona

Prilikom računanja entropije polazimo od izraza za slobodnu energiju elektronskog gasa [16,22]:

$$F = -\theta \sum_{\vec{k}} \ln \left\{ 1 + e^{[\mu - E(\vec{k})]/\theta} \right\}. \quad (2.75)$$

Prevodenjem sume po \vec{k} u integral na isti način kao u prethodnom slučaju kod izračunavanja unutrašnje energije i uvodjenjem istih smena i aproksimacija, izraz za slobodnu energiju (2.75) postaje:

$$F = -\frac{1}{15} \frac{N_x N_y N_z}{\pi^2 W^{3/2}} \mu^{5/2} \left[1 + \frac{5\pi^2}{8} \left(\frac{\theta}{\mu} \right)^2 \right], \quad (2.76)$$

odakle se zamenom (2.71) u (2.76) dobija:

$$F_b = -\frac{2}{5} N \mu_{b0} \left[1 + \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{\theta}{\mu_{b0}} \right)^2 \right]. \quad (2.77)$$

Kako je entropija [16,27]:

$$S = -\frac{3}{2} \frac{k_B}{N} \frac{\partial F}{\partial \theta}, \quad (2.78)$$

to sledi:

$$S_b = \frac{k_B \pi^2 \theta}{2 \mu_{b0}}. \quad (2.79)$$

Vidi se da je entropija numerički jednaka toplotnom kapacitetu elektrona. To se moglo zaključiti i iz drugačijeg prilaza [33,51,52]:

$$S = \int \frac{C}{\theta} d\theta, \quad (2.80)$$

jer je u području degeneracije toplotni kapacitet fermionskog gasa proporcionalan temperaturi.

3 Elektroni u tankim filmovima

U prethodnoj glavi istraženi su spektri i stanja naelektrisanja i njihov ideo u termodinamici neograničenih struktura. Primjenjujući analogni pristup ovde ćemo odrediti iste karakteristike naelektrisanja, ali u kristalnim film-strukturama. Za razliku od idealnih beskonačnih struktura, realni kristali ne poseduju osobinu transalcione invarijantnosti. Narušenje simetrije, koje je uslovljeno prisustvom granica, dovodi do pojave novih i savršeno neočekivanih svojstava.

Poseban interes za proučavanjem ovih struktura javio se nakon sintetizovanja novih perovskitnih materijala koji, pogodnijim spaterovanjem, postaju visokotemperaturski superprovodnici [53-61]. Pokazano je da su ove keramike izrazito slojevite strukture u kojima je dominantna pojava periodičnog rasporeda CuO_2 ravni. Zbog toga se može pretpostaviti da se ponašaju kao sistem tankih spaterovanih filmova koji se sastoje od nekoliko slojeva [53,57-59]. Logično je stoga, pretpostaviti da se u fizičkim karakteristikama tankih filmova kriju koreni objašnjenja visokotemperaturske superprovodnosti [58]. Iz tih razloga najveći deo istraživanja tankih filmova posvećen je ispitivanju njihovih superprovodnih svojstava. Ovde se prvenstveno radi na pokušajima stimulisanih efekata (povećanje superprovodne kritične temperature - pogodnija raspodela elektrona) [62,63], zatim izučavanju konkretnih kristalnih sistema u cilju istraživanja efekata važnih sa stanovišta praktične primene [64-66].

Pored superprovodnih, poslednjih godina se ispituju tanki filmovi sačinjeni od drugih vrsta materijala zahvaljujući njihovoј potencijalnoј primeni u optoelektronici i poluprovodničkoј tehnologiji. Posebno su interesantne fizičke osobine sistema film/substrat koji mogu biti načinjeni u raznim kombinacijama metal/poluprovodnik, metal/metal, dielektrik/poluprovodnik itd. Teorijska i eksperimentalna istraživanja velikog broja fizičkih osobina (dielektričnih [67-70], magnetnih [71,72] i drugih) i fenomena tankih filmova različitih vrsta materijala (organskih [70], prelaznih metala [71] ili teorijskih modela [67-69,72]) pokazuju kardinalnu razliku u poređenju sa odgovarajućim masivnim uzorcima.

Ove razlike javljaju se prvenstveno kao posledica prostorne ograničenosti film-struktura, usled čega dolazi do kvantovanja normalne komponente kretanja naelektrisanja. To se, pre svega, odnosi na energiju elektrona koja je kvantovana usled elektronskog konfinovanja. Energetski spektar se cepta na niz diskretnih nivoa [29, 72-83], pri čemu je minimalna, tzv. nulta energija, u filmu različita od nule. Postojanje izvesnih graničnih uslova jedan je od uzroka narušenja simetrije. Promena graničnih uslova (perturbacionih parametara) na graničnim površinama dovodi do niza efekata značajnih sa aspekta transportnih karakteristika ovih struktura. Ovi granični uslovi mogu se menjati adsorpcijom različitih materijala ili pomoću spoljašnjeg polja [84]. Lokalni karakter gustine stanja, oscilovanje Fermijevog nivoa, pojava površinskih lokalizovanih stanja [72, 78,80,83] i mnogi drugi efekti, izdvajaju filmove kao strukture sa sasvim novim fizičkim osobinama.

Metodom Grinovih funkcija ovde je analiziran uticaj granica i izmenjenih energetskih parametara u graničnim slojevima na energetski spektar i stanja elektrona u filmu sa primitivnom kubnom rešetkom [72-83, 85-88], kao i filmu sa dve podrešetke. Pomoću polova Grinovih funkcija nadjen je energetski spektar, a pomoću dijagonalnih komponenti spektralne težine elektrona. Za film sa primitivnom kubnom rešetkom izračunat je elektronski ideo u termodinamičkim svojstvima - topotnom kapacitetu i entropiji [24,89,90].

3.1 Spektri i stanja elektrona

Ovde će najpre biti razmatrana kristalna film-struktura sa primitivnom kubnom rešetkom, a potom struktura sa dve podrešetke. U oba slučaja se posmatra tanki film načinjen na supstratu nekim tehničko-tehnološkim postupkom (naparavanjem, spaterovanjem i sl.) [91]. Takodje se uzima da u filmu nema narušenja kristalne strukture (bez prisustva defekata, primesa i sl.). Biće pokazano da napuštajući koncept o kvantnim jamama, tj. tretirajući film kao beskonačno duboku kvantu jamu možemo dobiti nove rezultate za energetske spekture elektrona.

Hamiltonian vezanih elektrona u tankim kristalnim filmovima možemo formirati polazeći od „balkovskog“ hamiltonijana (2.27), odnosno hamiltonijana (2.29) u aproksimaciji najbližih suseda u obliku:

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

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 $+\infty$).

3.1.1 Kristalna film-struktura sa primitivnom kubnom rešetkom

Razmotrimo najpre, radi jednostavnosti, kristalni film sa primitivnom kubnom rešetkom.

Model filma kubne kristalne strukture

Na slici 3.1 je dat presek modela ove kristalne strukture. Dimenzije filma su takve da je on u XY ravnima beskonačan, a u z pravcima ima konačnu debljinu (L), odnosno ograničen je ravnima (001) [73-83, 85-90, 92, 93]. Znači da ovaj film poseduje dve beskonačne granične površine paralelne XY ravnima i to za: $z = 0$ i $z = L$.

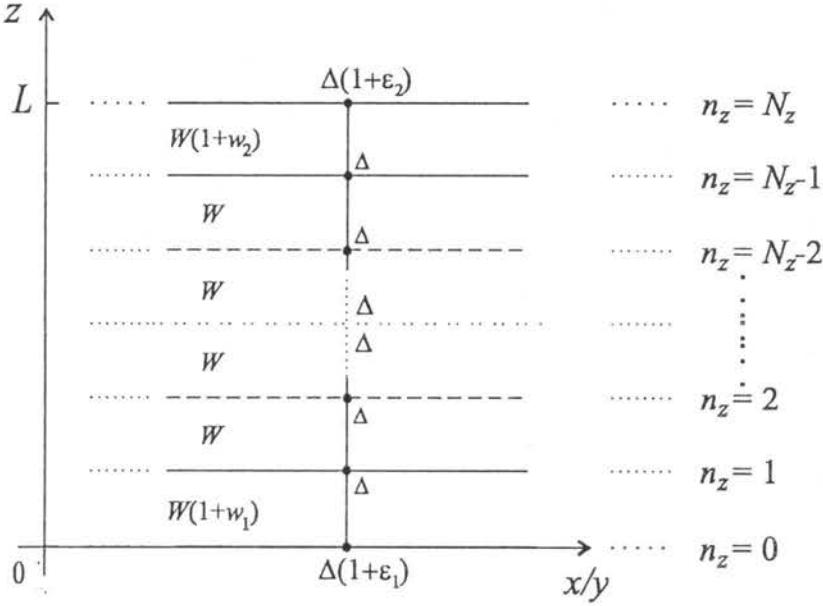
Zbog izmenjenih uslova na granicama filma, uzećemo da je:

$$\begin{aligned} \Delta_{n_x n_y n_z}^{(n_z < 0; n_z > N_z)} &= 0 ; \quad \Delta_{n_x n_y n_z}^{(1 \leq n_z \leq N_z - 1)} = \Delta \\ \Delta_{n_x n_y 0} &= \Delta (1 + \varepsilon_1) ; \quad \Delta_{n_x n_y N_z} = \Delta (1 + \varepsilon_2) , \end{aligned} \quad (3.2)$$

gde je Δ - energija elektrona na čvoru kod beskonačnog kristala. Površinski parametri ε_1 i ε_2 (koji mogu biti > 0 i/ili < 0) izražavaju relativnu promenu ove energije na granicama filma. Matrične elemente elektronskog preskoka sa sloja na sloj, možemo izraziti:

$$\begin{aligned} W_{n_x n_y n_z; n_x \pm 1, n_y, n_z}^{(0 \leq n_z \leq N_z)} &= W_{n_x n_y n_z; n_x n_y \pm 1, n_z}^{(0 \leq n_z \leq N_z)} = W_{n_x n_y n_z; n_x n_y n_z + 1}^{(0 < n_z < N_z - 1)} = W_{n_x n_y n_z; n_x n_y n_z - 1}^{(1 < n_z < N_z)} \equiv W \\ W_{n_x n_y 0; n_x n_y 1} &= W(1 + w_1) ; \quad W_{n_x n_y N_z - 1; n_x n_y N_z} = W(1 + w_2) \\ W_{n_x n_y n_z; n_x n_y n_z - 1}^{(n_z \leq 0)} &= W_{n_x n_y n_z; n_x n_y n_z + 1}^{(n_z \geq N_z)} = 0 , \end{aligned} \quad (3.3)$$

gde je W - konstanta elektronskog transfera idealnog kristala. Površinski parametri w_1 , w_2 (mogu biti > 0 i/ili < 0) opisuju relativnu promenu matričnog elementa elektronskog transfera (W) izmedju graničnih i njima susednih slojeva filma.

Slika 3.1: Presek modela kristalnog filma u $X(Y)Z$ ravni

Elektronski hamiltonijan tankih kristalnih filmova možemo sada napisati u obliku:

$$H = H_z + H_p , \quad (3.4)$$

$$\begin{aligned} H_z &= \sum_{m_x m_y} \sum_{m_z=2}^{N_z-2} a_{m_x m_y m_z}^+ [\Delta a_{m_x m_y m_z} - W (a_{m_x+1, m_y m_z} + a_{m_x-1, m_y m_z} + \\ &+ a_{m_x m_y+1, m_z} + a_{m_x m_y-1, m_z} + a_{m_x m_y m_z+1} + a_{m_x m_y m_z-1})] ; \\ H_p &= \sum_{m_x m_y} \left\{ a_{m_x m_y 0}^+ [(1 + \varepsilon_1) \Delta a_{m_x m_y 0} - W(1 + w_1) a_{m_x m_y 1}] + \right. \\ &+ a_{m_x m_y 1}^+ [\Delta a_{m_x m_y 1} - W(1 + w_1) a_{m_x m_y 0}] + \\ &+ a_{m_x m_y N_z-1}^+ [\Delta a_{m_x m_y N_z-1} - W(1 + w_2) a_{m_x m_y N_z}] + \\ &+ a_{m_x m_y N_z}^+ [(1 + \varepsilon_2) \Delta a_{m_x m_y N_z} - W(1 + w_2) a_{m_x m_y N_z-1}] - \\ &- W a_{m_x m_y 0}^+ (a_{m_x+1, m_y 0} + a_{m_x-1, m_y 0} + a_{m_x m_y+1, 0} + a_{m_x m_y-1, 0}) - \\ &- W a_{m_x m_y 1}^+ (a_{m_x+1, m_y 1} + a_{m_x-1, m_y 1} + a_{m_x m_y+1, 1} + a_{m_x m_y-1, 1}) - \\ &- W a_{m_x m_y N_z-1}^+ (a_{m_x+1, m_y N_z-1} + a_{m_x-1, m_y N_z-1} + a_{m_x m_y+1, N_z-1} + a_{m_x m_y-1, N_z-1}) - \\ &\left. - W a_{m_x m_y N_z}^+ (a_{m_x+1, m_y N_z} + a_{m_x-1, m_y N_z} + a_{m_x m_y+1, N_z} + a_{m_x m_y-1, N_z}) \right\} . \end{aligned}$$

Jednačine kretanja

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

$$G_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z}(t) = \Theta(t) \langle \{ a_{n_x n_y n_z}(t), a_{m_x m_y m_z}^+(0) \} \rangle , \quad (3.5)$$

koje određuju ravnotežna svojstva elektrona u tankim kristalnim filmovima (videti u dodatku 6.1).

Elektronske Grinove funkcije se mogu izračunati mikroteorijskom procedurom na sličan način kao što je uradjeno u prethodnoj glavi. Potrebno je pre svega formirati jednačine kretanja diferenciranjem prethodnog izraza po vremenu:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} G_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z}(t) &= i\hbar \delta(t) \delta_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z} + \\ &+ \Theta(t) \langle \{ [a_{n_x n_y n_z}(t), H], a_{m_x m_y m_z}^+(0) \} \rangle \end{aligned} \quad (3.6)$$

i izračunati odgovarajuće komutatore (istim postupkom kao i za idealne strukture), nakon čega dobijamo:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} G_{\vec{n}, \vec{m}}(t) &= i\hbar \delta_{\vec{n} \vec{m}} \delta(t) + \Delta G_{\vec{n}, \vec{m}}(t) - \\ &- W \left[G_{n_x+1, n_y n_z; \vec{m}}(t) + G_{n_x-1, n_y n_z; \vec{m}}(t) + G_{n_x n_y+1, n_z; \vec{m}}(t) + \right. \\ &\left. + G_{n_x n_y-1, n_z; \vec{m}}(t) + G_{n_x n_y n_z+1; \vec{m}}(t) + G_{n_x n_y n_z-1; \vec{m}}(t) \right]. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Uvodjenjem vremenske i delimične¹² prostorne Furije-transformacije:

$$G_{n_x n_y n_z; \vec{m}}(t) = \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i[k_x a_x(n_x - m_x) + k_y a_y(n_y - m_y)]} e^{-i\omega t} G_{n_x; m_z}(k_x, k_y; \omega) \quad (3.8)$$

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

(gde je: $n_z = 0, 1, 2, \dots, N_z$ i $a_x = a_y = a$), te zamenom gornjih transformacija u jednačinu kretanja (3.7) dobija se:

$$\begin{aligned} \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega t} e^{ia[k_x(n_x - m_x) + k_y(n_y - m_y)]} \{ [\hbar\omega - \Delta + \\ + W (e^{iak_x} + e^{-iak_x} + e^{iak_y} + e^{-iak_y})] G_{n_x; m_z}(k_x k_y; \omega) + \\ + W [G_{n_x+1; m_z}(k_x k_y; \omega) + G_{n_x-1; m_z}(k_x k_y; \omega)] - \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{n_x m_z} \} = 0, \end{aligned}$$

odnosno:

$$\begin{aligned} [\hbar\omega - \Delta + 2W(\cos ak_x + \cos ak_y)] G_{n_x; m_z}(k_x k_y; \omega) + \\ + W [G_{n_x+1; m_z}(k_x k_y; \omega) + G_{n_x-1; m_z}(k_x k_y; \omega)] = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{n_x m_z}, \end{aligned} \quad (3.9)$$

koja važi za $1 < n_x < N_x - 1$. Ukoliko je $n_x = 0$, jednačina kretanja ima oblik:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} G_{n_x n_y 0; \vec{m}}(t) &= i\hbar \delta_{n_x m_x} \delta_{n_y m_y} \delta_{0, m_z} \delta(t) + \\ &+ (1 + \varepsilon_1) \Delta G_{n_x n_y 0; \vec{m}}(t) - (1 + w_1) W G_{n_x n_y 1; \vec{m}} - \\ &- W \left[G_{n_x+1, n_y 0; \vec{m}}(t) + G_{n_x-1, n_y 0; \vec{m}}(t) + G_{n_x n_y+1, 0; \vec{m}}(t) + G_{n_x n_y-1, 0; \vec{m}}(t) \right]. \end{aligned} \quad (3.10)$$

¹²Prostorna 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.

Uvodjenjem Furije-transformacija, uz uslov $n_z = 0$, dobija se

$$\begin{aligned} & \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega t} e^{ia[k_x(n_x - m_x) + k_y(n_y - m_y)]} \{ 2\pi [\hbar\omega - (1 + \varepsilon_1) \Delta + \\ & + W (e^{iak_x} + e^{-iak_x} + e^{iak_y} + e^{-iak_y})] G_{0;m_z}(k_x k_y; \omega) + \\ & + (1 + w_1) W G_{1;m_z}(k_x k_y; \omega) - \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{0,m_z} \} = 0, \end{aligned}$$

odnosno:

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - (1 + \varepsilon_1)\Delta + 2W(\cos ak_x + \cos ak_y)] G_{0;m_z}(k_x k_y; \omega) + \\ & + (1 + w_1) W G_{1;m_z}(k_x k_y; \omega) = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{0,m_z}. \end{aligned} \quad (3.11)$$

U slučaju $n_z = 1$, jednačina kretanja će biti:

$$\begin{aligned} & i\hbar \frac{d}{dt} G_{n_x n_y 1; \vec{m}}(t) = i\hbar \delta_{n_x m_x} \delta_{n_y m_y} \delta_{1 m_z} \delta(t) + \Delta G_{n_x n_y 1; \vec{m}}(t) - \\ & - (1 + w_1) W G_{n_x n_y 0; \vec{m}} - W [G_{n_x+1, n_y 1; \vec{m}}(t) + G_{n_x-1, n_y 1; \vec{m}}(t) + \\ & + G_{n_x n_y +1, 1; \vec{m}}(t) + G_{n_x n_y -1, 1; \vec{m}}(t) + G_{n_x n_y 2; \vec{m}}(t)]. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Analognim postupkom kao u prethodnom slučaju, preko Furije-transformacija (3.8), dobija se:

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - \Delta + 2W(\cos ak_x + \cos ak_y)] G_{1;m_z}(k_x k_y; \omega) + \\ & + W [G_{2;m_z}(k_x k_y; \omega) + (1 + w_1) G_{0;m_z}(k_x k_y; \omega)] = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{1,m_z}, \end{aligned} \quad (3.13)$$

dok se za $n_z = N_z - 1$, istim proračunom dobija:

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - \Delta + 2W(\cos ak_x + \cos ak_y)] G_{N_z-1;m_z}(k_x k_y; \omega) + \\ & + W [G_{N_z-2;m_z}(k_x k_y; \omega) + (1 + w_2) G_{N_z;m_z}(k_x k_y; \omega)] = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{N_z-1,m_z}. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Za slučaj $n_z = N_z$, jednačina kretanja se na isti način svodi na:

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - (1 + \varepsilon_2)\Delta + 2W(\cos ak_x + \cos ak_y)] G_{N_z;m_z}(k_x k_y; \omega) + \\ & + (1 + w_2) W G_{N_z-1;m_z}(k_x k_y; \omega) = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{N_z,m_z}. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Sada možemo formirati sistem od jednačina (3.9), (3.11) i (3.13-3.15). Svaku od ovih jednačina delimo sa W , pri čemu uvodimo oznake:

$$\begin{aligned} & \varrho = \hbar \frac{\omega}{W} - \frac{\Delta}{W} + 2(\cos ak_x + \cos ak_y); \\ & G_{n_z;m_z}(k_x, k_y; \omega) \equiv G_{n_z}; \quad \mathcal{K}_{n_z} = \frac{i\hbar}{2\pi W} \delta_{n_z, m_z} \end{aligned} \quad (3.16)$$

(indeks m_z je „parazitski“ - videti u dodatku 6.1, pa je ovde izbačen). Pomenuti sistem jednačina ima onda oblik:

$$\begin{aligned}
 (\varrho - \frac{\Delta}{W}\varepsilon_1) G_0 + (1+w_1) G_1 &= \mathcal{K}_0 \\
 (1+w_1) G_0 + \varrho G_1 + G_2 &= \mathcal{K}_1 \\
 G_1 + \varrho G_2 + G_3 &= \mathcal{K}_2 \\
 \\
 G_{n_z-1} + \varrho G_{n_z} + G_{n_z+1} &= \mathcal{K}_{n_z}
 \end{aligned} \tag{3.17}$$

$$\begin{aligned}
 G_{N_z-3} + \varrho G_{N_z-2} + G_{N_z-1} &= \mathcal{K}_{N_z-2} \\
 G_{N_z-2} + \varrho G_{N_z-1} + (1+w_2) G_{N_z} &= \mathcal{K}_{N_z-1} \\
 (1+w_2) G_{N_z-1} + (\varrho - \frac{\Delta}{W}\varepsilon_2) G_{N_z} &= \mathcal{K}_{N_z}
 \end{aligned}$$

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:

$$G_{n_z} = \frac{\mathcal{D}_{n_z}}{\mathcal{D}_{N_z+1}},$$

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 u dodatku 6.1), koji se dobijaju kada iste teže beskonačnosti, što znači da mora biti:

$$\mathcal{D}_{N_z+1} \equiv 0, \tag{3.18}$$

$$\mathcal{D}_{N_z+1}(\varrho) = \left| \begin{array}{ccccccc} \varrho - \frac{\Delta}{W}\varepsilon_1 & 1+w_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 1+w_1 & \varrho & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \varrho & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & \varrho & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & \varrho & 1+w_2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1+w_2 & \varrho - \frac{\Delta}{W}\varepsilon_2 \end{array} \right|_{N_z+1} \tag{3.19}$$

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

$$\begin{aligned}
 \mathcal{D}_{N_z+1}(\varrho) &= \left(\varrho - \frac{\Delta}{W}\varepsilon_1 \right) \left(\varrho - \frac{\Delta}{W}\varepsilon_2 \right) \mathcal{P}_{N_z-1} - \left[(1+w_1)^2 \left(\varrho - \frac{\Delta}{W}\varepsilon_2 \right) + \right. \\
 &\quad \left. + (1+w_2)^2 \left(\varrho - \frac{\Delta}{W}\varepsilon_1 \right) \right] \mathcal{P}_{N_z-2} + (1+w_1)^2 (1+w_2)^2 \mathcal{P}_{N_z-3},
 \end{aligned} \tag{3.20}$$

gde je \mathcal{P}_{N_z} polinom tipa Čebiševa (videti u dodatku 6.2).

Zakon disperzije

Uslov (3.18), u opštem slučaju, može da se reši numerički za zadate parametre $\varepsilon_{1/2}, w_{1/2}$ i N_z [73-76], ali i analitički u tri karakteristična slučaja [72,92]. Pri tome je uvek $w_1 = w_2 = 0$, dok parametri ε mogu uzimati vrednosti:

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0; \quad \varepsilon_1 = 0, \varepsilon_2 = -\frac{W}{\Delta}; \quad \varepsilon_1 = \varepsilon_2 = -\frac{W}{\Delta}. \tag{3.21}$$

Prvi i drugi uslov poznati su kao Dirihičevi i Nojmanovi granični uslovi, respektivno [72].

Prvi slučaj (Dirihičevi uslovi) analitičkog rešenja (neperturbovan (idealan) film) odgovara film-strukturi „isečenoj” iz beskonačne [85-86]. Tada je:

$$\mathcal{D}_{N_z+1}(\varrho) = \mathcal{P}_{N_z+1}(\zeta) = \frac{\sin(N_z + 2)\zeta}{\sin \zeta}; \quad \varrho = 2 \cos \zeta. \quad (3.22)$$

Iz uslova (3.18), tj. za $\mathcal{P}_{N_z+1} \equiv 0$, dobija se:

$$\zeta_\mu = \frac{\pi \mu}{N_z + 2}; \quad \mu = 1, 2, 3, \dots, N_z + 1. \quad (3.23)$$

Na osnovu ovoga i jednačine (3.16) nalazimo:

$$\hbar \omega_\mu = \Delta - 2W (\cos ak_x + \cos ak_y - \cos \zeta_\mu), \quad (3.24)$$

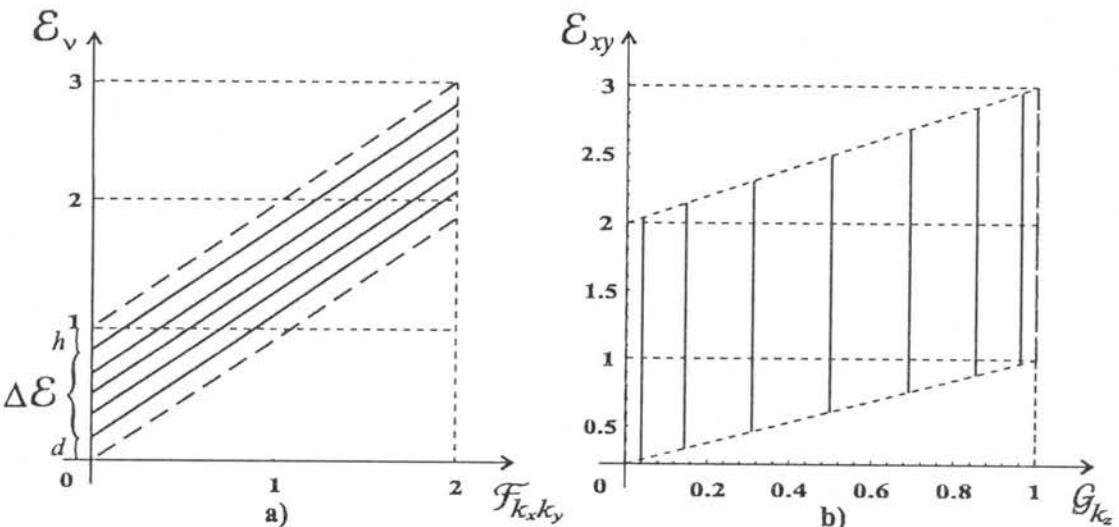
gde je $\cos \zeta_\mu = -\cos ak_z(\nu)$, $\nu = N_z + 2 - \mu$, a

$$k_z(\nu) = \frac{\pi - \zeta_\mu}{a} = \frac{\pi}{a} \frac{\nu}{N_z + 2}; \quad \nu = 1, 2, 3, \dots, N_z + 1. \quad (3.25)$$

Zamenom ovih relacija u (3.20) i uzimajući u obzir da je $E_{\vec{k}}(\nu) = \hbar\omega_\nu$ i $\Delta = 6W$, sledi:

$$\mathcal{E}_{\vec{k}}(\nu) \equiv \mathcal{F}_{k_x k_y} + \mathcal{G}_{k_z}(\nu), \quad (3.26)$$

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



Slika 3.2: Zakon disperzije elektrona (elektronskog gasa) u filmu

Izraz (3.26) predstavlja zakon disperzije slabo vezanih elektrona u filmu (grafički je prikazan na slici 3.2) i ima istu formu kao izraz (2.48) dobijen za idealne neograničene strukture, s razlikom što je tamo k_z praktično kontinualno promenljivo (u intervalu $[0, \pi/a]$)¹³ kao što su k_x i k_y , a ovde je diskretno - dato izrazom (3.25). Na slici 3.2 prikazan je zakon disperzije elektrona u filmu (slika a) se odnosi na petoslojni film i veličinom $\mathcal{F}_{k_x k_y}$ kao parametrom, a slika b) na

¹³Posmatramo samo „desnu” polovicu spektra ($k_j \geq 0$, $j = x, y, z$) znajući da je on ogledalski simetričan.

film od sedam slojeva i veličinom $\mathcal{G}_{k_z}(\nu)$ kao parametrom), gde je izmedju isprekidanih linija predstavljena zona kontinualnih dozvoljenih energija u idealnim (neograničenim) strukturama, dok su punim linijama označene diskretnе vrednosti elektronskih energija u filmu.

Pored toga, pošto je u pitanju tanak film, odnosno: $N_z \ll (N_x, N_y)$, uočava se da je:

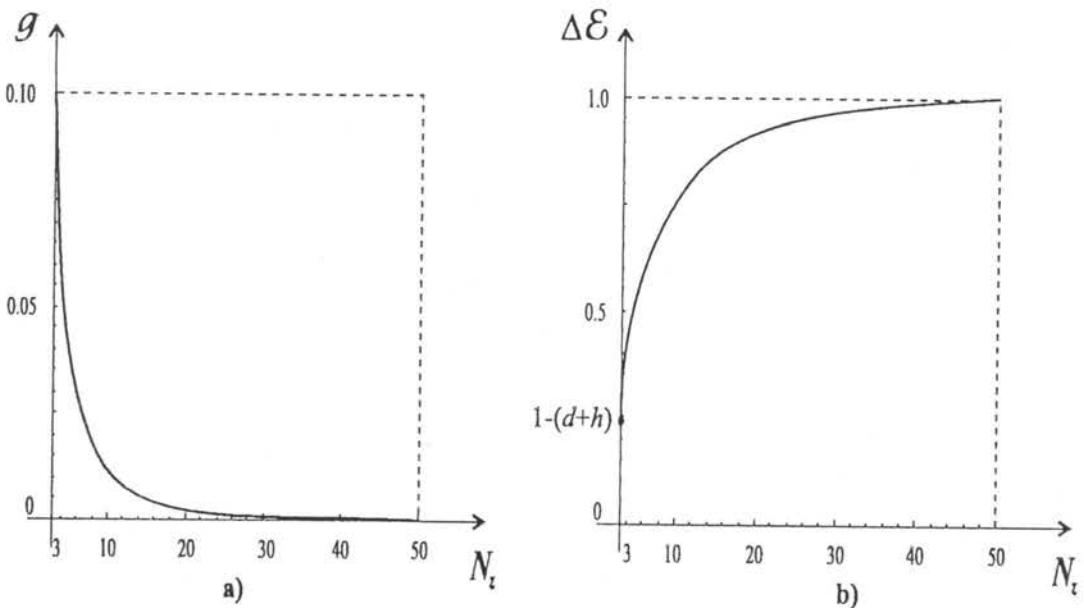
$$\begin{aligned} k_x^{\min} &= k_y^{\min} = 0 ; & k_z^{\min} &= \frac{\pi}{a} \frac{1}{N_z + 2} > 0 \\ k_x^{\max} &= k_y^{\max} = \frac{\pi}{a} ; & k_z^{\max} &= \frac{\pi}{a} \frac{N_z + 1}{N_z + 2} < \frac{\pi}{a} . \end{aligned} \quad (3.27)$$

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

U skladu sa gore pomenutim, dolazimo do zaključka da elektronski spektar u tankom filmu poseduje dva energetska gepa (slika 3.2a), donji d i gornji h :

$$d \equiv \mathcal{E}_f^{\min} - \mathcal{E}_b^{\min} = \frac{1}{4} \left(\frac{\pi}{N_z + 2} \right)^2 = \mathcal{E}_b^{\max} - \mathcal{E}_f^{\max} \equiv h \quad (3.28)$$

(indeks f označava film, a b beskonačnu strukturu). Vidi se, a i na slici 3.3a je to grafički predstavljeno, da veličine gepova naglo opadaju sa debljinom filma (kvadratna zavisnost). To znači da je njihova praktična egzistencija vezana samo za ultratanke (nano) strukture [92,94].



Slika 3.3: Zavisnost energetskog gepa (a) i širine dozvoljene energetske zone (b) od debljine filma

Pojava ovog kvantnog dimenzionog efekta nije ekstremna novina [94]. Postojanje energetskog gepa potvrdila su ispitivanja optičkih svojstava tankih filmova nekih materijala [95]. U ovim eksperimentima je uočen pomak crvene granice fotoapsorpcije pri izmeni debljine filma.

Posebno je fizički značajan donji energetski gep koji bi mogao da se tumači kao energija aktivacije $G = 4Wd = k_B T_{ac}$, gde je T_{ac} njemu pridružena aktivaciona temperatura¹⁴. Na

¹⁴Ova temperatura je pridružena energiji aktivacije - donjem (pravom) energetskom gepu [24]. U masivnim - neograničenim strukturama ova veličina ne egzistira jer je $d_b = 0$. Iz izraza (3.28) vidi se da se ona ponaša na isti način kao energetski gepovi - veoma brzo (parabolički) opada sa porastom broja slojeva N_z . Za izuzetno tanke filmove T_{ac} je relativno visoka, dok za $N_z \rightarrow \infty$ ona teži nuli.

taj način, za nastanak elementranih pobudjenja u sistemu potrebno je uložiti energiju veću od energije aktivacije. Ako se uzme u obzir da su u sistemu prisutni i fononi [89,90,96,97], za pobudjenje kako elektronskog tako i fononskog podsistema treba uložiti energiju ili ih zagrevati do neke aktivacione temperature $T_{ac}^{e/f}$, što znači da se sistem do te temperature ponaša kao „zamrznut” (elektroni, a pogotovo fononi nisu prisutni, prigušeni su sve do $T_{ac}^{e/f}$) [89,90,97]. Za karakteristične vrednosti parametara keramičkih visokotemperaturnih provodnika [98] i zadate vrednosti fenomenološkog parametra $W \sim 1$ eV (za film sa oko dvadesetak slojeva) može se proceniti: $T_{ac}^{e/f} = k_B^{-1} G_{e/f} \approx 30$ K. Sve do ovih temperatura fononi su prigušeni [97], a nosioci nanelektrisanja mogu kroz film da se slobodno - bezotporno prostiru (to je stanje idealne električne provodnosti). „Zamrzavanje” elektronskog podsistema može se turnaći i tako da se u film-strukturama, za veličinu donjeg energetskog gepa, podiže energija osnovnog stanja. Samo elektroni sa energijama većim od ove minimalne mogu da učestvuju u transportnim i fizički interesantnim procesima. Temperatura iznad koje su u filmu prisutni i fononi i slobodni elektroni (koji tek tada mogu da stupe u međusobnu interakciju i formiraju Kuperove parove, čime je omogućen superprovodni transfer nanelektrisanja u filmu) može se proceniti kao superpozicija elektronske i fononske aktivacione temperature: $T_{ac} = T_{ac}^e + T_{ac}^f \approx 60$ K. Dakle, da bi se u filmu ostvarili uslovi kakvi su prisutni u klasičnim superprovodnicima, a to su elektroni u fononskom polju [99], potrebno je „podići” temperaturu sistema na oko 60 K. Sve do te temperature nema električnog otpora u sistemu i postoje uslovi za idealno električno provodjenje. Tek iznad ove temperature elektroni mogu da se vezuju u Kuperove parove i kao takvi učestvuju u superprovodjenju. Ako prihvativimo BCS prilaz [99-101] onda bi kritična temperatura superprovodnog prelaza ultratankih filnova mogla da se proceni na oko:

$$T_C = T_{ac}(+)T_{BCS} \leq 100K,$$

što je u saglasnosti sa eksperimentalnim podacima [98].

Zbog postajanja gornjeg energetskog gepa, širine dozvoljenih energetskih zona elektrona (a i fonona [96,97]) su smanjene, pa ova elementrana pobudjenja imaju „manevarski prostor” i lakše se vezuju. Pored toga, gornji energetski gep u elektronskom spektru tankih filmova redefiniše položaj Fermijevog nivoa (spušta ga za vrednost h) u odnosu na njegovu vrednost kod masivnih uzoraka [24].

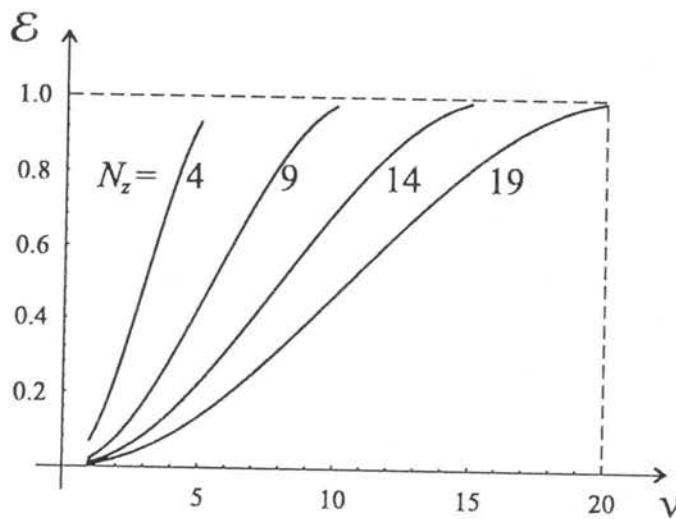
Osnovna posledica postojanja energetskih gepova je „suženje” zone dozvoljenih energija elektrona (slika 3.3b):

$$\Delta\mathcal{E} \equiv (\Delta\mathcal{E})_f = (\Delta\mathcal{E})_b - (d + h) = 1 - \frac{1}{2} \left(\frac{\pi}{N_z + 2} \right)^2. \quad (3.29)$$

Sa slike 3.3b se vidi da se širina energetske zone elektrona kristalnog filma veoma brzo (parabolički) približava balkovskoj vrednosti, kada se debljina filma povećava, tj. kada raste broj slojeva N_z . Za izuzetno tanke filmove $(\Delta\mathcal{E})_f$ je veoma uska, dok za $N_z \rightarrow \infty$ ona teži $(\Delta\mathcal{E})_b$.

Zavisnost energije elektrona $\mathcal{E}_\nu(0)$ ($k_x = k_y = 0$) od dozvoljenih vrednosti kvaziimpulsa poprečnog (u odnosu na XY ravni) kretanja ($k_z = k_z(\nu)$) prikazan je na slici 3.4 za filmove različitih debljin $L = N_z a$.

Vidi se da se pri smanjenju debljine filma energije podzona povećavaju kao i rastojanje izmedju njih. Kretanje elektrona u svim slojevima filma paralelnim XOY ravni, ostaje isto kao i u masivnom kristalu.



Slika 3.4: Zavisnost energije elektrona od kvaziimpulsa

Na osnovu izraza za tenzor efektivne mase elektrona (2.14), odnosno (2.47) i izraza (3.26) sledi da se za efektivnu masu naelektrisanja u film-strukturama dobija ista zavisnost kao i za beskonačne strukture (2.47). Ta činjenica dovodi do zaključka da je efektivna masa elektrona/šupljina ista u oba posmatrana sistema i da karakter elementarnih nosilaca naelektrisanja, prisustvom granica, nije izmenjen.

Što se tiče druga dva analitička rešenja, nije teško pokazati [72,92] da se u tim slučajevima dobijaju vrednosti:

$$\zeta_\mu = \frac{\pi\mu}{N_z + \frac{3}{2}} \text{ za: } \epsilon_1 = 0, \epsilon_2 = -\frac{W}{\Delta}; \quad \zeta_\mu = \frac{\pi\mu}{N_z + 1} \text{ za: } \epsilon_1 = \epsilon_2 = -\frac{W}{\Delta}. \quad (3.30)$$

Analizirajući analitički moguće slučajeve (3.23) i (3.30) može se naći aproksimativno analitičko rešenje, u opštem slučaju, u obliku:

$$\zeta_\mu = \frac{\pi\mu}{N_z + f(\epsilon_{1/2}, w_{1/2})}. \quad (3.31)$$

Korišćenjem trigonometrijskog oblika Čebiševljevih polinoma (videti u dodatku 6.2):

$$\mathcal{P}_n(\varrho) = \frac{\sin(n+1)\zeta_\mu}{\sin \zeta_\mu}, \quad (3.32)$$

gde je $\varrho = 2 \cos \zeta_\mu$, za male $f(\epsilon_{1/2}, w_{1/2})$ možemo izvršiti sledeće aproksimacije [92]:

$$\sin N_z \zeta_\mu \approx -(-1)^\mu f \zeta_\mu, \quad \cos N_z \zeta_\mu \approx (-1)^\mu, \quad \sin \zeta_\mu \approx \zeta_\mu, \quad \cos \zeta_\mu \approx 1. \quad (3.33)$$

Stavljujući to u (3.18) dobijamo aproksimativne izraze za f , ζ_ν i energetske gepove g . Tako je u opštem slučaju:

$$f_{d(+)}^{h(-)} \approx 2 \frac{(1 \pm \frac{\Delta}{2W}\epsilon_1)(1+w_2)^2 + (1 \pm \frac{\Delta}{2W}\epsilon_2)(1+w_1)^2 - (1+w_1)^2(1+w_2)^2}{4(1 \pm \frac{\Delta}{2W}\epsilon_1)(1 \pm \frac{\Delta}{2W}\epsilon_2) - 2[(1 \pm \frac{\Delta}{2W}\epsilon_1)(1+w_2)^2 + (1 \pm \frac{\Delta}{2W}\epsilon_2)(1+w_1)^2] + (1+w_1)^2(1+w_2)^2} \quad (3.34)$$

Kako je izračunavanje energetskih geova veoma komplikovano, analiziraće se samo simetričan slučaj ($\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon$, $w_1 = w_2 = w$):

$$g_{d(+)}^{h(-)} \approx 2 \left[1 - \cos \frac{\pi}{N_z + 2 \frac{2 \pm \frac{\Delta}{W} \epsilon - (1+w)^2}{(1+w)^2}} \right]. \quad (3.35)$$

Ovaj izraz važi za $f \geq 0$, tj. u oblasti $\frac{\Delta}{W} \epsilon \geq (1+w)^2 - 2$ za donji energetski ge, kao i $\frac{\Delta}{W} \epsilon \leq 2 - (1+w)^2$ za gornji ge.

U svim ostalim slučajevima (opšti slučaj) mora se primeniti numeričko rešavanje uslova (3.18) za zadate vrednosti parametara $\epsilon_{1/2}$, $w_{1/2}$ kao i broj slojeva filma N_z . Rešavanjem jednačine (3.20), odnosno uslova (3.18) po promenljivoj ϱ_ν ($\nu = 1, 2, 3, \dots, N_z + 1$), iz jednačine (3.16) se dobija zakon disperzije obliku:

$$\mathcal{E}_{\vec{k}}(\nu) \equiv \frac{\hbar\omega_{\vec{k}}(\nu) - \Delta + 6W}{4W} = \mathcal{F}_{k_x k_y} + \mathcal{G}_{k_z}(\nu), \quad \mathcal{G}_{k_z}(\nu) = \frac{\varrho_\nu + 2}{4}, \quad (3.36)$$

gde je: $\mathcal{F}_{k_x k_y}$ isto kao u izrazu (3.26)

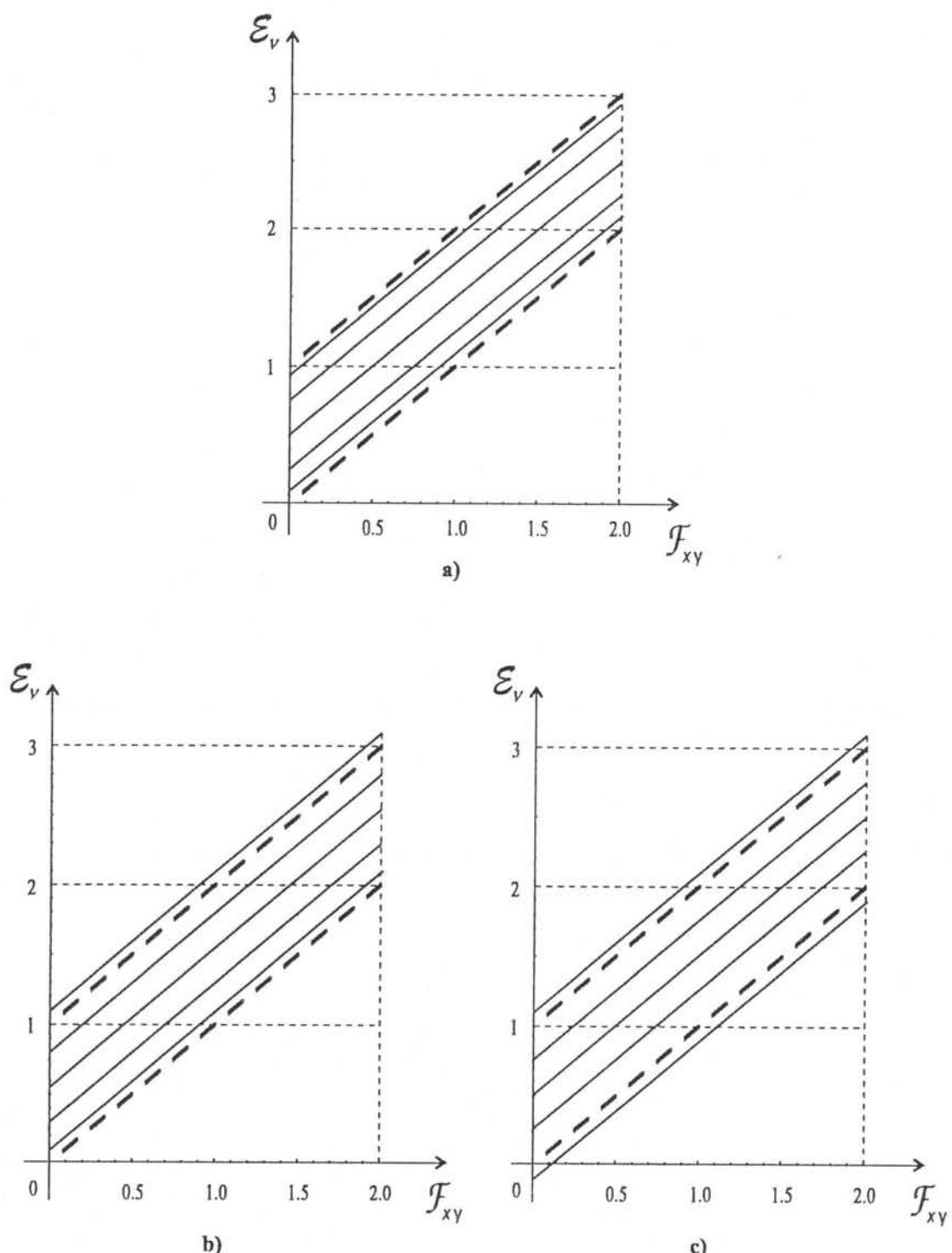
Rezultati numeričke procedure prikazani su u tabelama (3.1-3.3) i slici 3.5, gde su analizirane redukovane energije ($\frac{\hbar\omega - \Delta + 6W}{W} = 4\mathcal{E}_{\vec{k}}(\nu)$) elektrona u zavisnosti od graničnih parametara za petoslojni film ($N_z = 4$) pri $k_x = k_y = 0$.

Elektronska stanja

Analiza dobijenih i tabelarno prikazanih rezultata pokazuje niz vrlo zanimljivih podataka koji ukazuju na sledeći (veoma bitan) uticaj svih graničnih parametara modelne strukture.

- Povećanjem energije elektrona na površinskim slojevima filma (parametara $\epsilon_{1/2}$), ceo spektar se pomera ka višim vrednostima energija, pa čak može da izadje i van najviše balkovske granice.
- Povećanjem energije elektronskog transfera izmedju graničnih i njima susednih slojeva (parametara $w_{1/2}$), energetski spektar se širi, prema ili van granica energetske zone idealnog kristala.
- Pored „sužene“ energetske zone (redukovane energije $0 < 4\mathcal{E} < 4$), što je prikazano na slici 3.5a, (sva energetska stanja filma leže unutar energetske zone idealnog kristala) kada spektar poseduje gornji i donji energetski ge, zona dozvoljenih elektronskih energija može da se proširi i van balkovskih granica. Tada se pojavljuju i lokalizovana elektronska stanja (samo jedno, što je prikazano na slici 3.5b, ili dva, slika 3.5c¹⁵). Pokazano je [102] da se lokalizovana stanja javljaju u slučaju kada su perturbowane energije elektronskog transfera u XY graničnim ravnima, dok u slojevima paralelnim ovim ravnima nema perturbacije. Međutim, ovde ja analizirana pojava lokalizovanih stanja (numerički i grafički) u slučaju perturbacije elektronskih energija i elektronskog transfera u graničnim i njima susednim slojevima duž z-pravca.

¹⁵Broj lokalizovanih stanja nije ograničen na najviše dva, jer se povećanjem debljine filma mogu javiti još neka.



Slika 3.5: Energetski spektri elektrona tankog filma:

- unutar balkovskih granica (a)
- pojava lokalizovanog stanja elektrona (b)
- pojava lokalizovanih stanja elektrona (c)

Tabela 3.1		Spektri elektrona u (petoslojnom $N_z = 4$) filmu						
Granični parametri				Redukovane energije ($4 \mathcal{E}_\nu$)				
$\frac{\Delta}{W} \varepsilon_1$	w_1	$\frac{\Delta}{W} \varepsilon_2$	w_2	$4 \mathcal{E}_1$	$4 \mathcal{E}_2$	$4 \mathcal{E}_3$	$4 \mathcal{E}_4$	$4 \mathcal{E}_5$
-0.50	-0.60	-0.50	-0.60	0.51	1.28	1.54	2.22	3.46
			-0.50	0.48	1.24	1.55	2.27	3.47
			-0.40	0.45	1.19	1.56	2.32	3.48
		-0.25	-0.35	0.46	1.25	1.64	2.40	3.50
			-0.25	0.43	1.22	1.63	2.46	3.52
			-0.15	0.39	1.18	1.62	2.51	3.55
		0.00	-0.10	0.40	1.22	1.67	2.62	3.59
			0.00	0.37	1.19	1.66	2.69	3.63
			0.10	0.32	1.15	1.64	2.71	3.67
		0.25	0.15	0.33	1.18	1.68	2.81	3.75
			0.25	0.28	1.15	1.66	2.84	3.81
			0.35	0.23	1.12	1.65	2.86	3.88
		0.50	0.40	0.25	1.15	1.68	2.93	3.99
			0.50	0.20	1.12	1.66	2.95	4.07
			0.60	0.14	1.10	1.65	2.96	4.15
	-0.50	-0.50	-0.60	0.48	1.24	1.55	2.27	3.47
			-0.50	0.46	1.19	1.56	2.31	3.48
			-0.40	0.44	1.15	1.57	2.36	3.49
		-0.25	-0.35	0.44	1.20	1.67	2.44	3.51
			-0.25	0.41	1.16	1.66	2.49	3.53
			-0.15	0.38	1.12	1.65	2.54	3.56
		0.00	-0.10	0.38	1.16	1.71	2.65	3.60
			0.00	0.35	1.12	1.70	2.70	3.64
			0.10	0.31	1.09	1.68	2.74	3.68
		0.25	0.15	0.32	1.12	1.73	2.84	3.75
			0.25	0.27	1.09	1.71	2.87	3.81
			0.35	0.23	1.06	1.70	2.89	3.88
		0.50	0.40	0.24	1.08	1.72	2.96	3.99
			0.50	0.19	1.05	1.71	2.98	4.07
			0.60	0.13	1.03	1.70	2.99	4.15
	-0.40	-0.50	-0.60	0.45	1.19	1.56	2.32	3.48
			-0.50	0.44	1.15	1.57	2.36	3.49
			-0.40	0.41	1.10	1.58	2.40	3.51
		-0.25	-0.35	0.42	1.15	1.69	2.47	3.52
			-0.25	0.39	1.11	1.68	2.53	3.54
			-0.15	0.36	1.07	1.68	2.58	3.57
		0.00	-0.10	0.36	1.10	1.75	2.68	3.61
			0.00	0.33	1.06	1.73	2.73	3.65
			0.10	0.29	1.03	1.72	2.77	3.69
		0.25	0.15	0.30	1.05	1.77	2.87	3.76
			0.25	0.26	1.02	1.75	2.90	3.82
			0.35	0.21	0.99	1.74	2.92	3.88
		0.50	0.40	0.23	1.01	1.77	2.99	3.99
			0.50	0.18	0.98	1.76	3.01	4.07
			0.60	0.13	0.96	1.74	3.02	4.15

Tabela 3.2 Spektri elektrona u (petoslojnom $N_z = 4$) filmu

		Granični parametri		Redukovane energije ($4 \mathcal{E}_\nu$)				
$\frac{\Delta}{W} \varepsilon_1$	w_1	$\frac{\Delta}{W} \varepsilon_2$	w_2	$4 \mathcal{E}_1$	$4 \mathcal{E}_2$	$4 \mathcal{E}_3$	$4 \mathcal{E}_4$	$4 \mathcal{E}_5$
-0.10	-0.10	-0.50	-0.60	0.40	1.22	1.67	2.62	3.59
			-0.50	0.38	1.16	1.71	2.65	3.60
			-0.40	0.36	1.10	1.75	2.68	3.61
		-0.25	-0.35	0.37	1.16	1.87	2.73	3.62
			-0.25	0.35	1.11	1.89	2.77	3.63
			-0.15	0.32	1.06	1.91	2.82	3.65
		0.00	-0.10	0.32	1.10	2.00	2.90	3.68
			0.00	0.29	1.05	2.00	2.95	3.71
			0.10	0.26	1.01	2.00	2.99	3.74
		0.25	0.15	0.27	1.04	1.94	3.08	3.80
			0.25	0.23	1.00	2.06	3.11	3.85
			0.35	0.19	0.96	2.05	3.15	3.91
		0.50	0.40	0.21	0.98	2.09	3.21	4.01
			0.50	0.16	0.95	2.08	3.23	4.09
			0.60	0.11	0.92	2.07	3.24	4.16
0.00	0.00	-0.50	-0.60	0.37	1.19	1.66	2.69	3.63
			-0.50	0.35	1.12	1.70	2.70	3.64
			-0.40	0.33	1.06	1.73	2.73	3.65
		-0.25	-0.35	0.33	1.12	1.87	2.78	3.65
			-0.25	0.31	1.06	1.88	2.82	3.67
			-0.15	0.29	1.01	1.90	2.87	3.68
		0.00	-0.10	0.30	1.05	2.00	2.95	3.71
			0.00	0.27	1.00	2.00	3.00	3.73
			0.10	0.24	0.95	2.00	3.05	3.76
		0.25	0.15	0.24	0.99	2.07	3.14	3.82
			0.25	0.21	0.94	2.06	3.17	3.87
			0.35	0.17	0.90	2.05	3.21	3.92
		0.50	0.40	0.19	0.93	2.10	3.27	4.02
			0.50	0.14	0.89	2.09	3.29	4.09
			0.60	0.09	0.85	2.08	3.31	4.17
0.10	0.10	-0.50	-0.60	0.32	1.15	1.64	2.71	3.67
			-0.50	0.31	1.09	1.68	2.74	3.68
			-0.40	0.29	1.03	1.72	2.77	3.69
		-0.25	-0.35	0.29	1.08	1.86	2.82	3.70
			-0.25	0.28	1.02	1.88	2.87	3.71
			-0.15	0.26	0.96	1.89	2.92	3.72
		0.00	-0.10	0.26	1.01	2.00	2.99	3.74
			0.00	0.24	0.95	2.00	3.05	3.76
			0.10	0.21	0.90	2.00	3.10	3.79
		0.25	0.15	0.22	0.92	2.07	3.19	3.84
			0.25	0.18	0.89	2.06	3.23	3.88
			0.35	0.15	0.84	2.06	3.27	3.94
		0.50	0.40	0.16	0.87	2.11	3.34	4.03
			0.50	0.12	0.83	2.10	3.36	4.10
			0.60	0.08	0.79	2.09	3.37	4.17

Tabela 3.3		Spektri elektrona u (petoslojnom $N_z = 4$) filmu						
Granični parametri				Redukovane energije ($4 \mathcal{E}_\nu$)				
$\frac{\Delta}{W} \varepsilon_1$	w_1	$\frac{\Delta}{W} \varepsilon_2$	w_2	$4 \mathcal{E}_1$	$4 \mathcal{E}_2$	$4 \mathcal{E}_3$	$4 \mathcal{E}_4$	$4 \mathcal{E}_5$
0.40	0.50	-0.50	-0.60	0.25	1.15	1.68	2.93	3.99
			-0.50	0.24	1.08	1.72	2.96	3.99
			-0.40	0.23	1.01	1.77	2.99	3.99
			-0.25	0.23	1.07	1.92	3.04	4.00
			-0.25	0.22	1.01	1.95	3.08	4.00
			-0.15	0.20	0.94	1.97	3.13	4.01
		0.00	-0.10	0.21	0.98	2.09	3.21	4.01
			0.00	0.19	0.93	2.10	3.27	4.02
			0.10	0.16	0.87	2.11	3.34	4.03
		0.25	0.15	0.16	0.90	2.19	3.44	4.05
			0.25	0.14	0.85	2.19	3.51	4.06
			0.35	0.11	0.80	2.19	3.59	4.09
		0.50	0.40	0.12	0.83	2.24	3.67	4.14
			0.50	0.08	0.78	2.24	3.72	4.18
			0.60	0.04	0.74	2.23	3.75	4.23
		-0.50	-0.60	0.20	1.12	1.66	2.95	4.07
			-0.50	0.19	1.05	1.71	2.98	4.07
			-0.40	0.18	0.98	1.76	3.01	4.07
			-0.35	0.18	1.04	1.91	3.05	4.07
			-0.25	0.17	0.97	1.93	3.10	4.08
			-0.15	0.15	0.91	1.96	3.15	4.08
		0.00	-0.10	0.16	0.95	2.08	3.23	4.09
			0.00	0.14	0.89	2.09	3.29	4.09
			0.10	0.12	0.83	2.10	3.36	4.10
		0.25	0.15	0.13	0.86	2.19	3.47	4.11
			0.25	0.10	0.81	2.18	3.54	4.12
			0.35	0.08	0.75	2.18	3.60	4.14
		0.50	0.40	0.08	0.78	2.24	3.72	4.18
			0.50	0.05	0.73	2.23	3.77	4.21
			0.60	0.02	0.68	2.22	3.82	4.26
		0.60	-0.50	0.14	1.10	1.65	2.96	4.15
			-0.50	0.13	1.03	1.70	2.99	4.15
			-0.40	0.13	0.96	1.74	3.02	4.15
			-0.35	0.13	1.00	1.90	3.06	4.15
			-0.25	0.12	0.94	1.93	3.11	4.16
			-0.15	0.10	0.88	1.95	3.16	4.16
		0.00	-0.10	0.11	0.92	2.07	3.24	4.16
			0.00	0.09	0.85	2.08	3.31	4.17
			0.10	0.08	0.79	2.09	3.37	4.17
		0.25	0.15	0.08	0.82	2.18	3.49	4.18
			0.25	0.06	0.76	2.17	3.56	4.19
			0.35	0.04	0.71	2.17	3.63	4.21
		0.50	0.40	0.04	0.74	2.23	3.75	4.23
			0.50	0.02	0.68	2.22	3.82	4.26
			0.60	-0.01	0.63	2.22	3.87	4.30

Na osnovu podataka iz prethodnih tabela, kao i grafički prikazanih rezultata na slici 3.5, sledi da će najviša energija u spektru izaći iz energetske zone masivnog kristala za veće vrednosti parametara $\frac{\Delta}{W}\varepsilon_{1/2}$ i $w_{1/2}$, tj. pojaviće se lokalizovana stanja elektrona. To se vidi iz tabele 3.3 naročito za $\frac{\Delta}{W}\varepsilon_1 = \frac{\Delta}{W}\varepsilon_2 = 0.5$ i $w_1 = w_2 = 0.6$ kada je najviša elektronska energija $4\varepsilon = 4.30$ (zadnja vrsta u tabeli 3.3). Takodje zbog velikog širenja spektra elektrona pri $w_1 = w_2 = 0.6$ i pored toga što je spektar pomeren ka višim energijama (zbog $\frac{\Delta}{W}\varepsilon_1 = \frac{\Delta}{W}\varepsilon_2 = 0.5$), uočava se da je minimalna energija elektrona manja od nule, tj. javlja se lokalizovano stanje sa energijom ispod energetske zone masivnog kristala.

Uslove za pojavu lokalizovanih stanja¹⁶ nalazimo iz jednačine (3.18) uvrštavajući $\omega_{min} < 0$, pri čemu su: $\varrho < -2$ i $\mathcal{P}_n = (-1)^n(n+1)$ ili $\omega_{max} > 0$, sa $\varrho > 2$ i $\mathcal{P}_n = n+1$, a sve to uz $k_x = k_y = 0$ u oba slučaja.

$$\left(2 + \frac{\Delta}{W}\varepsilon - (1+w)^2\right) \left[N_z \left(2 + \frac{\Delta}{W}\varepsilon - (1+w)^2\right) + 2(1+w)^2\right] < 0; \quad \omega_{min} < 0, \quad (3.37)$$

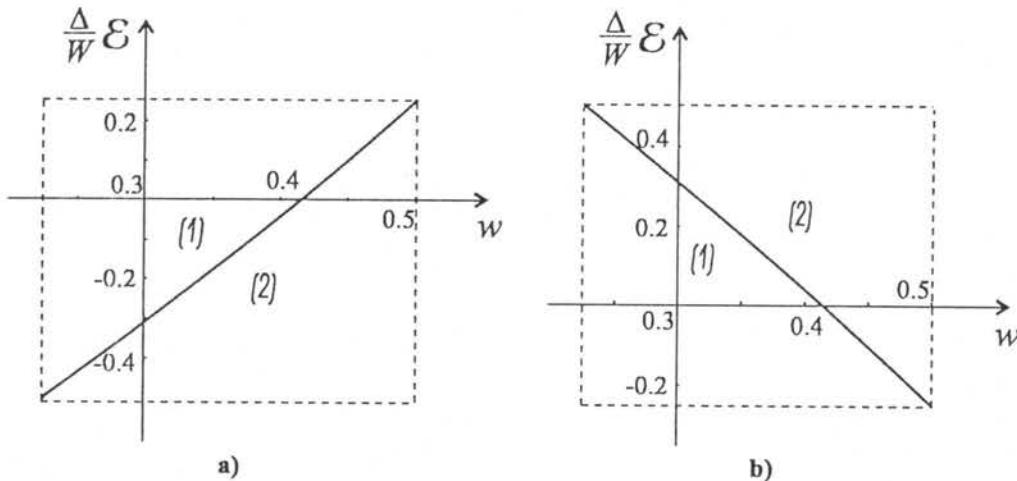
$$\left(2 - \frac{\Delta}{W}\varepsilon - (1+w)^2\right) \left[N_z \left(2 - \frac{\Delta}{W}\varepsilon - (1+w)^2\right) + 2(1+w)^2\right] > 0; \quad \omega_{max} > \frac{\Delta - 2W}{\hbar}.$$

Rešavanjem jednačina se dobijaju uslovi:

$$\frac{\Delta}{W}\varepsilon < (1+w)^2 - 2; \quad \omega_{min} < 0, \quad (3.38)$$

$$\frac{\Delta}{W}\varepsilon > 2 - (1+w)^2; \quad \omega_{max} > \frac{\Delta - 2W}{\hbar}, \quad (3.39)$$

Zanimljivo je da ovi uslovi ne zavise od broja slojeva (debljine filma) N_z , što je prikazano na slikama 3.6 a i b, respektivno (oblasti gde se pojavljuju lokalizovana stanja obeležena su brojem 2).



Slika 3.6: Fazni dijagrami graničnih uslova za pojavu lokalizovanih stanja (energetskih nivoa) ispod balkovskih granica (a) i iznad balkovskih granica (b)

¹⁶Ova stanja razmatrali smo za slučaj simetričnog filma: $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 \equiv \varepsilon$ i $w_1 = w_2 \equiv w$.

U želji da ispitamo zavisnost energije lokalizovanih stanja elektrona od debljine filma, analizirali smo ponašanje veličine redukovanih energija ($4\mathcal{E}$) od N_z u karakterističnom slučaju, odnosno za: $\frac{\Delta}{W}\varepsilon_1 = \frac{\Delta}{W}\varepsilon_2 = 0.5$ i $w_1 = w_2 = 0.6$, što je prikazano u tabeli 3.4 (treba imati u vidu da su energije u intervalu $4\mathcal{E}_2 \div 4\mathcal{E}_{N_z-1}$ unutar balkovske zone, pa nisu unete u tabelu).

LOKALIZOVANA STANJA				
Broj slojeva $N_z + 1$	Reducovane energije			
	$4\mathcal{E}_1$	$4\mathcal{E}_2 \div 4\mathcal{E}_{N_z-1}$	$4\mathcal{E}_{N_z}$	$4\mathcal{E}_{N_z+1}$
3	-0.0265			4.5265
4	-0.0171			4.3694
5	-0.0126			4.2962
6	-0.0100		4.0179	4.2552
7	-0.0083		4.0894	4.2399
8	-0.0071		4.1269	4.2136
9	-0.0062		4.1479	4.2027
10	-0.0055		4.1602	4.1953
11	-0.0050		4.1675	4.1903
12	-0.0046		4.1721	4.1862
13	-0.0042		4.1749	4.1846
14	-0.0039		4.1767	4.1831
15	-0.0036		4.1779	4.1821
16	-0.0034		4.1786	4.1814
17	-0.0032		4.1791	4.1809
18	-0.0030		4.1794	4.1806
19	-0.0028		4.1796	4.1804
20	-0.0027		4.17978	4.1803
21	-0.0026		4.17987	4.1802
22	-0.0025		4.17993	4.18015
23	-0.0024		4.17997	4.1800

Tabela 3.4: Zavisnost energije lokalizovanih stanja od N_z

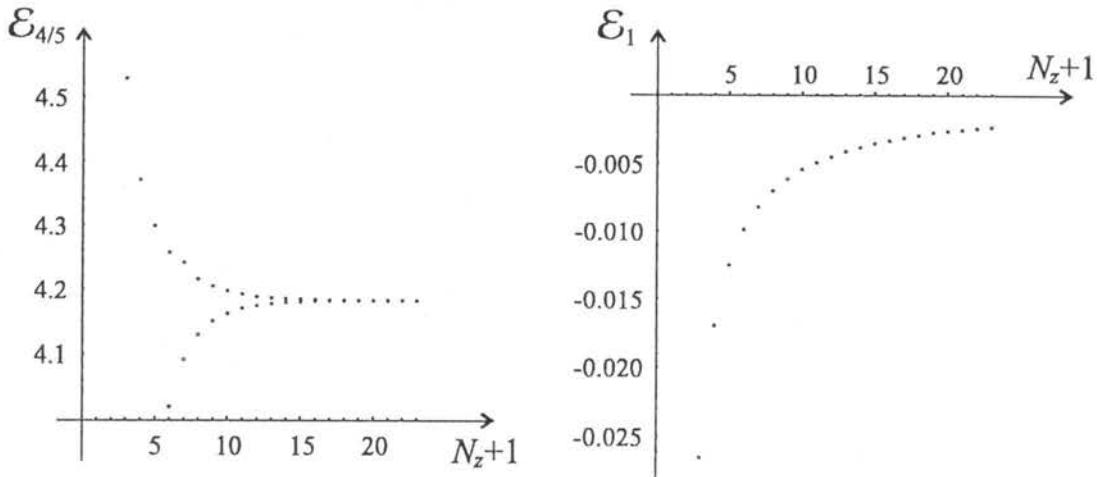
Analizom podataka iz tabele 3.4 vidi se da sa povećanjem debljine filma energije lokalizovanih elektronskih stanja teže granicama energetske zone idealnog kristala, što je i grafički prikazano (u graničnom slučaju $N_z \rightarrow \infty$) na slici 3.7a (donja lokalizovana stanja) i 3.7b (gornja).

Zavisnost energije lokalizovanih stanja od debljine filma, kao i energije tih stanja mogu se naći korišćenjem hiperboličnog oblika Čebiševljevih polinoma:

$$\mathcal{P}_n(\varrho) = \frac{\sinh(n+1)\eta}{\sinh \eta}; \quad \varrho = 2 \cosh \eta.$$

Zamenom u jednačinu (3.18), primenom teoreme adicije i stavljajući $\lim_{N_z \rightarrow \infty} \tanh N_z \eta = 1$, dobija se jednačina za ϱ_{loc} koja ne zavisi od debljine filma N_z :

$$\begin{aligned} \left[\varrho_{loc} - \frac{\Delta}{W}\varepsilon - (1+w)^2 \cosh \eta \right]^2 &+ 2(1+w)^2 \sinh \eta \left[\varrho_{loc} - \frac{\Delta}{W}\varepsilon - (1+w)^2 \cosh \eta \right] + \\ &+ (1+w)^4 \sinh^2 \eta = 0. \end{aligned}$$



Slika 3.7: Zavisnost energije lokalizovanih stanja od debljine filma
a - iznad balkovskih granica; b - ispod balkovskih granica

Red jednačine može biti smanjen, na taj način dobijamo koren jednačine za ϱ_{loc} u sledećem obliku:

$$w(w+2)\varrho_{loc}^2 - \frac{\Delta}{W}\varepsilon \left[(1+w)^2 - 2 \right] \varrho_{loc} - \left(\frac{\Delta}{W} \right)^2 \varepsilon^2 - (1+w)^4 = 0, \quad (3.40)$$

koja važi kako za donja, tako i za gornja lokalizovana stanja, gde je uslov za njihovu pojavu ispunjen [92].

Zbog činjenice da energije lokalizovanih stanja, povećanjem debljine filma, stapanju u jednu vrednost, ova analiza može takodje biti primenjena i na model polubeskonačnog kristala. U tom slučaju lokalizovana elektronska stanja mogu da se pojave na perturbovanim površinama sistema.

Formalno, uslovi za pojavu lokalizovanih stanja mogu se dobiti stavljanjem $\varepsilon_1 = \varepsilon$, $w_1 = w$ (za perturbovanu površinu) i $\varepsilon_2 = 0$, $w_2 = 0$ (za drugu, neperturbovanu površinu koja leži u beskonačnosti - $N_z \rightarrow \infty$). Determinanta sistema je tada:

$$\mathcal{D}_{N_z+1}(\varrho) = \varrho \left(\varrho - \frac{\Delta}{W} \varepsilon \right) \mathcal{P}_{N_z-1} - \left[(1+w)^2 \varrho + \varrho - \frac{\Delta}{W} \varepsilon \right] \mathcal{P}_{N_z-2} + (1+w)^2 \mathcal{P}_{N_z-3} = 0 \quad (3.41)$$

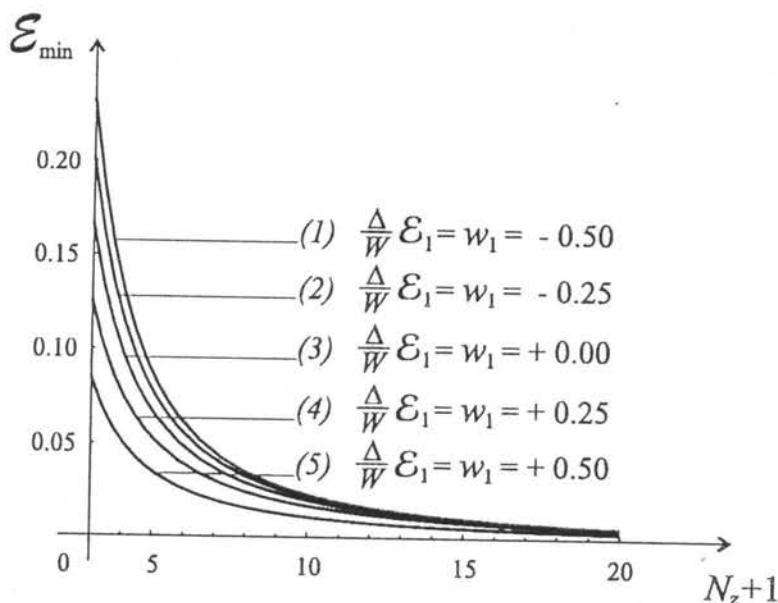
Stavljujući iste uslove kao i za slučaj filma: $\omega_{min} < 0$ za $\varrho < -2$ i $\mathcal{P}_n = (-1)^n(n+1)$ ili $\omega_{max} > 0$ za $\varrho > 2$ i $\mathcal{P}_n = n+1$, kao i $k_x = k_y = 0$ (u oba slučaja) dobija se:

$$\frac{\Delta}{W} \varepsilon < \frac{N_z}{N_z+1} (1+w)^2 - 2; \quad \omega_{min} < 0, \quad (3.42)$$

$$\frac{\Delta}{W} \varepsilon > 2 - \frac{N_z}{N_z+1} (1+w)^2; \quad \omega_{max} > \frac{\Delta - 2W}{\hbar}, \quad (3.43)$$

Stavljujući $N_z \rightarrow \infty$ ovi uslovi se poklapaju sa uslovima (3.38) i (3.39) za simetrično perturbovan tanki film. Dakle, film dovoljne debljine (već za $N_z > 20$) se ponaša kao polubeskonačni kristal, odnosno granice filma ne utiču jedna na drugu zbog velike debljine filma.

Minimalna vrednost energije nosilaca naelektrisanja u tankom filmu je različita od nule. Veličina ovog (donjeg) energetskog gega zavisi kako od graničnih energetskih parametara ($\varepsilon_{1/2}$, $w_{1/2}$), tako i od debljine filma (N_z) sa čijim povećanjem vrlo brzo postaje iščezavajuće mala (slika 3.8, u svim slučajevima uzeto je: $\varepsilon_2 = w_2 = 0$).



Slika 3.8: Zavisnost minimalne energije od debljine filma

Sa ove slike je jasna tendencija i odlučujuća zavisnost opadanja veličine gega (pa i T_{ac}) sa povećanjem debljine filma. Uticaj perturbacija graničnih energetskih parametara (Δ_{1/N_z} , W_{1/N_z}) promenom $\varepsilon_{1/2}$ i $w_{1/2}$ je ipak minoran jer treba uzeti u obzir da su čak i nano-strukture teško praktično izvodljive sa manje od 5 atomskih ravnih, gde bi ovaj uticaj imao značajne reperkusije.

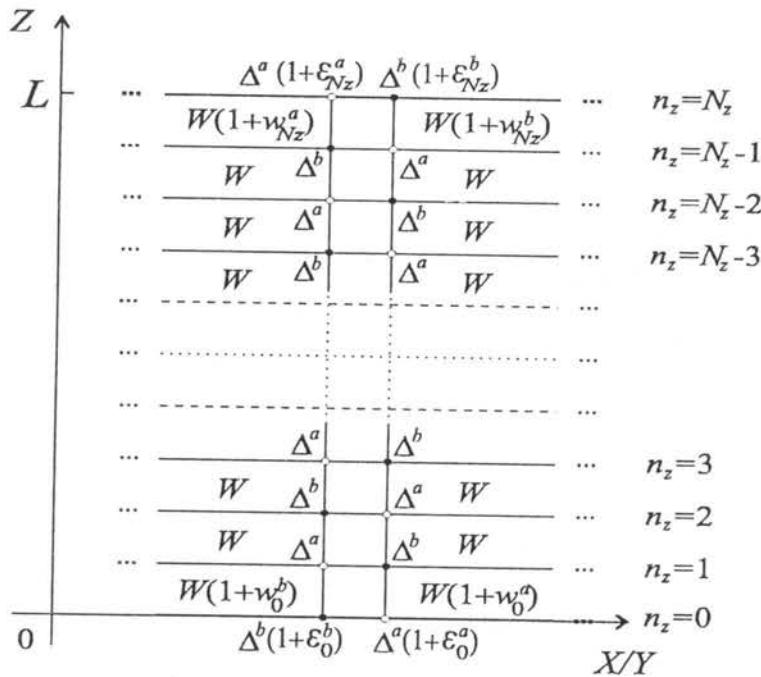
3.1.2 Kristalna film-struktura sa dve podrešetke

Na osnovu prethodnog modela filma, formiran je model kristalne film-strukture sa podrešetkom - tipa $NaCl$. Sličnim postupkom izračunavanja kao za odgovarajuću beskonačnu kristalnu strukturu, ali uz primenu odgovarajućih transformacija iz prethodnog poglavlja, dođen je zakon disperzije elektrona u filmu sa podrešetkom [87,88].

Model perturbovanog filma sa podrešetkom

Kao i u prethodnom slučaju, narušavanje translacione simetrije, kod ovog modela, 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). Dakle, i ovaj film poseduje dve beskonačne granične površi paralelne XY ravnina i to za: $z = 0$ i $z = L$ (slika 3.9).

Na ovoj slici je šematski prikazan model kristalne film-strukture sa podrešetkom. 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. Perturbacija filma uvodi se preko sledećih parametara: $\varepsilon_{0/N_z}^{a/b}$ - opisuju relativnu promenu energije elektrona ($\Delta^{a/b}$) lokalizovanih na čvoru \vec{n} ($n_z = 0, N_z$) i parametara $w_{0/N_z}^{a/b}$ koji opisuju perturbaciju elektronskog transfera W izmedju susednih čvorova



Slika 3.9: Presek modela kristalne film-strukture tipa *NaCl*

koji se nalaze u površinskim slojevima, na granici. Prema tome se može napisati:

$$\begin{aligned} W_{n_z, n_z-1} &\equiv W_z^{a/b} = W_z \left(1 + w_0^{a/b} \delta_{1, n_z}^{b/a} + w_{N_z}^{b/a} \delta_{N_z, n_z}^{b/a} \right), \\ W_{n_z, n_z+1} &\equiv W_z^{a/b} = W_z \left(1 + w_0^{a/b} \delta_{0, n_z}^{a/b} + w_{N_z}^{b/a} \delta_{N_z-1, n_z}^{a/b} \right), \\ \Delta_z^{a/b} &= \Delta^{a/b} \left(1 + \varepsilon_0^{a/b} \delta_{0, n_z}^{a/b} + \varepsilon_{N_z}^{b/a} \delta_{N_z, n_z}^{b/a} \right). \end{aligned} \quad (3.44)$$

U skladu sa gore navedenim hamiltonijan posmatrane strukture je oblika:

$$\begin{aligned} H = & \sum_{m_x m_y} \sum_{m_z}^{N_z} a_{m_x m_y m_z}^+ \left[\Delta_z^{a/b} a_{m_x m_y m_z} - \right. \\ & - W_x^{a/b} (a_{m_x+1, m_y m_z} + a_{m_x-1, m_y m_z}) - W_y^{a/b} (a_{m_x m_y+1, m_z} + a_{m_x m_y-1, m_z}) - \\ & - W_z \left(1 + w_0^{a/b} \delta_{1, n_z}^{b/a} + w_{N_z}^{b/a} \delta_{N_z, n_z}^{b/a} \right) a_{m_x m_y, m_z-1} - \\ & \left. - W_z \left(1 + w_0^{a/b} \delta_{0, n_z}^{a/b} + w_{N_z}^{b/a} \delta_{N_z-1, n_z}^{a/b} \right) a_{m_x m_y, m_z+1} \right]. \end{aligned} \quad (3.45)$$

Jednačine kretanja

Postupak izračunavanja je analogan postupku za odgovarajuću balk strukturu, naravno uz primenu graničnih uslova (3.44). Zbog ograničenosti sistema, kao i kod prethodnog modela filma, moguće je uvesti samo delimičnu prostornu Furije transformaciju (duž x i y pravaca), nakon koje se dobijaju dva sistema jednačina za $2(N_z + 1)$ Grinovih funkcija. Prvi set Grinovih funkcija: $(G_0^a, G_1^b, G_2^a, \dots, G_{N_z-1}^a, G_{N_z}^b)$ odgovara nizu atoma (duž z -pravca) kada on počinje sa atomom vrste a u prvom XY -sloju ($n_z = 0$), dok u drugom setu: $(G_0^b, G_1^a, G_2^b, \dots, G_{N_z-1}^b, G_{N_z}^a)$ prvi sloj počinje atomom vrste b . Pored toga važi i $G_{n_z}^{a/b} = 0$ za $n_z > N_z$ i $n_z < 0$.

Prvi set jednačina ima sledeći oblik:

$$\begin{aligned}
 \hbar\omega G_{0;m_z}^a &= \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{0;m_z}^a + \Delta^a (1 + \varepsilon_0^a) G_{0;m_z}^a - W_z (1 + w_0^a) G_{1;m_z}^b - \\
 &- 2(W_x \cos a_x k_x + W_y \cos a_y k_y) G_{0;m_z}^b, \\
 \hbar\omega G_{1;m_z}^b &= \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{1;m_z}^b + \Delta^b G_{1;m_z}^b - W_z (1 + w_0^a) G_{0;m_z}^a - W_z G_{2;m_z}^a - \\
 &- 2(W_x \cos a_x k_x + W_y \cos a_y k_y) G_{1;m_z}^a, \\
 &\quad * \quad * \quad * \\
 \hbar\omega G_{2j;m_z}^a &= \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{2j;m_z}^a + \Delta^a G_{2j;m_z}^a - W_z (G_{2j-1;m_z}^b + G_{2j+1;m_z}^b) - \\
 &- 2(W_x \cos a_x k_x + W_y \cos a_y k_y) G_{2j;m_z}^b, \\
 \hbar\omega G_{2j+1;m_z}^b &= \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{2j+1;m_z}^b + \Delta^b G_{2j+1;m_z}^b - W_z (G_{2j;m_z}^a + G_{2j+2;m_z}^a) - \\
 &- 2(W_x \cos a_x k_x + W_y \cos a_y k_y) G_{2j+1;m_z}^a, \\
 &\quad * \quad * \quad * \\
 \hbar\omega G_{N_z-1;m_z}^a &= \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{N_z-1;m_z}^a + \Delta^a G_{N_z-1;m_z}^a - W_z G_{N_z-2;m_z}^b - W_z (1 + w_{N_z}^b) G_{N_z;m_z}^b - \\
 &- 2(W_x \cos a_x k_x + W_y \cos a_y k_y) G_{N_z-1;m_z}^b, \\
 \hbar\omega G_{N_z;m_z}^b &= \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{N_z;m_z}^b + \Delta^b (1 + \varepsilon_{N_z}^b) G_{N_z;m_z}^b - W_z (1 + w_{N_z}^b) G_{N_z-1;m_z}^a - \\
 &- 2(W_x \cos a_x k_x + W_y \cos a_y k_y) G_{N_z;m_z}^a,
 \end{aligned} \tag{3.46}$$

odnosno predstavljen u opštem obliku:

$$\begin{aligned}
 \hbar\omega G_{2j;m_z}^a &= \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{2j;m_z}^a + \Delta^a (1 + \varepsilon_0^a \delta_{0;n_z}^a) G_{2j;m_z}^a - W_z G_{2j-1;m_z}^b - \\
 &- W_z (1 + w_0^a \delta_{0;n_z}^a + w_{N_z}^b \delta_{N_z-1;n_z}^b) G_{2j+1;m_z}^b - \\
 &- 2(W_x \cos a_x k_x + W_y \cos a_y k_y) G_{2j;m_z}^b, \\
 \hbar\omega G_{2j+1;m_z}^b &= \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{2j+1;m_z}^b + \Delta^b (1 + \varepsilon_{N_z}^b \delta_{N_z;n_z}^b) G_{2j+1;m_z}^b - \\
 &- W_z (1 + w_0^a \delta_{1;n_z}^a + w_{N_z}^b \delta_{N_z;n_z}^b) G_{2j;m_z}^a - W_z G_{2j+2;m_z}^a - \\
 &- 2(W_x \cos a_x k_x + W_y \cos a_y k_y) G_{2j+1;m_z}^a; \\
 j &= 0, 1, 2, \dots, N_z/2.
 \end{aligned} \tag{3.47}$$

Prvi i drugi set jednačina su međusobno ekvivalentni ukoliko se uvede simena $a \leftrightarrow b$. Na taj način opšti oblik drugog seta je:

$$\begin{aligned}
 \hbar\omega G_{2j;m_z}^b &= \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{2j;m_z}^b + \Delta^b (1 + \varepsilon_0^b \delta_{0;n_z}^b) G_{2j;m_z}^b - \\
 &- W_z G_{2j-1;m_z}^a - W_z (1 + w_0^b \delta_{0;n_z}^b + w_{N_z}^a \delta_{N_z-1;n_z}^a) G_{2j+1;m_z}^a - \\
 &- 2G_{2j;m_z}^a (W_x \cos a_x k_x + W_y \cos a_y k_y), \\
 \hbar\omega G_{2j+1;m_z}^a &= \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{2j+1;m_z}^a + \Delta^a (1 + \varepsilon_{N_z}^a \delta_{N_z;n_z}^a) G_{2j+1;m_z}^a - \\
 &- W_z (1 + w_0^b \delta_{1;n_z}^b + w_{N_z}^a \delta_{N_z;n_z}^a) G_{2j;m_z}^b - W_z G_{2j+2;m_z}^b - \\
 &- 2G_{2j+1;m_z}^b (W_x \cos a_x k_x + W_y \cos a_y k_y).
 \end{aligned} \tag{3.48}$$

Zbog konciznijeg zapisa uvode se sledeće oznake:

$$\begin{aligned}\varrho &= \frac{\hbar w}{W_z} - \frac{\Delta^a}{W_z}; & R &= 2 \frac{W_x \cos a_x k_x + W_y \cos a_y k_y}{W_z}; \\ \mathcal{K}_{n_z; m_z}^{a/b} &= \frac{i\hbar}{2\pi} \frac{\delta_{n_z; m_z}^{a/b}}{W_z}; & \chi &= \frac{\Delta^b}{\Delta^a},\end{aligned}\quad (3.49)$$

tako da sada prvi set jednačina dobija sledeću formu (uopšteni oblik):

$$\begin{aligned}G_{2j-1; m_z}^b + \left(\varrho - \frac{\Delta^a}{W_z} \varepsilon_0^a \delta_{0, n_z}^a \right) G_{2j; m_z}^a &+ \\ + \left(1 + w_0^a \delta_{0, n_z}^a + w_{N_z}^b \delta_{N_z-1, n_z}^a \right) G_{2j+1; m_z}^b + RG_{2j; m_z}^b &= \mathcal{K}_{2j; m_z}^a, \\ \left(1 + w_0^a \delta_{1, n_z}^b + w_{N_z}^b \delta_{N_z, n_z}^b \right) G_{2j; m_z}^a + \left[\varrho + \frac{\Delta^a}{W_z} \left(1 - \chi - \chi \varepsilon_{N_z}^b \delta_{N_z, n_z}^b \right) \right] G_{2j+1; m_z}^b &+ \\ + G_{2j+2; m_z}^a + RG_{2j+1; m_z}^a &= \mathcal{K}_{2j+1; m_z}^b,\end{aligned}\quad (3.50)$$

a drugi set je:

$$\begin{aligned}G_{2j-1; m_z}^a + \left[\varrho + \frac{\Delta^a}{W_z} \left(1 - \chi - \chi \varepsilon_0^b \delta_{0, n_z}^b \right) \right] G_{2j; m_z}^b &+ \\ + \left(1 + w_0^b \delta_{0, n_z}^b + w_{N_z}^a \delta_{N_z-1, n_z}^b \right) G_{2j+1; m_z}^a + RG_{2j; m_z}^a &= \mathcal{K}_{2j; m_z}^b, \\ \left(1 + w_0^b \delta_{1, n_z}^a + w_{N_z}^a \delta_{N_z, n_z}^a \right) G_{2j; m_z}^b + \left(\varrho - \frac{\Delta^a}{W_z} \varepsilon_{N_z}^a \delta_{N_z, n_z}^a \right) G_{2j+1; m_z}^a &+ \\ + G_{2j+2; m_z}^b + RG_{2j+1; m_z}^b &= \mathcal{K}_{2j+1; m_z}^a.\end{aligned}\quad (3.51)$$

U cilju rešavanja osnovnog zadatka ovog rada - određivanje energije elektrona, potrebno je naći polove Grinovih funkcija, čiji realni delovi predstavljaju energije elementarnih ekscitacija sistema. Nalaženje elektronskih energija se, kao i u slučaju odgovarajućeg idelanog kristala, svodi na uslov $D = 0$. Determinanta (D) sistema jednačina (3.50) i (3.51) može se izraziti u konciznoj formi:

$$D = \begin{vmatrix} \hat{\mathcal{D}}^1_{N_z+1} & \hat{\mathcal{R}}_{N_z+1} \\ \hat{\mathcal{R}}_{N_z+1} & \hat{\mathcal{D}}^2_{N_z+1} \end{vmatrix}_{2(N_z+1)} \quad (3.52)$$

pri čemu je: $\hat{\mathcal{R}}_{N_z+1} = R \cdot \hat{I}_{N_z+1}$, dok \hat{I}_{N_z+1} predstavlja jediničnu matricu, a:

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{D}}^1_{N_z+1} &= \begin{vmatrix} \varrho - \frac{\Delta^a}{W_z} \varepsilon_0^a & 1 + w_0^a & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 1 + w_0^a & \varrho + \frac{\Delta^a}{W_z} (1 - \chi) & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \varrho & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \ddots & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \ddots & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \varrho + \frac{\Delta^a}{W_z} (1 - \chi) & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & \varrho & 1 + w_{N_z}^b \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 + w_{N_z}^b & \varrho + \frac{\Delta^a}{W_z} (1 - \chi - \chi \varepsilon_{N_z}^b) \end{vmatrix}_{N_z+1} \\ \hat{\mathcal{D}}^2_{N_z+1} &= \begin{vmatrix} \varrho + \frac{\Delta^a}{W_z} (1 - \chi - \chi \varepsilon_0^b) & 1 + w_0^b & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 1 + w_0^b & \varrho & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \varrho + \frac{\Delta^a}{W_z} (1 - \chi) & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \ddots & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \ddots & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \varrho & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & \varrho + \frac{\Delta^a}{W_z} (1 - \chi) & 1 + w_{N_z}^a \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 + w_{N_z}^a & \varrho - \frac{\Delta^a}{W_z} \varepsilon_{N_z}^a \end{vmatrix}_{N_z+1}\end{aligned}$$

Na osnovu uprošćenog modela, parametri na graničnim površinama i u graničnim slojevima treba da budu međusobno približno isti, tj.

$$\varepsilon_0^a = \varepsilon_0^b \equiv \varepsilon_0 ; \quad \varepsilon_{N_z}^a = \varepsilon_{N_z}^b \equiv \varepsilon_{N_z} ; \quad w_0^a \approx w_0^b \equiv w_0 ; \quad w_{N_z}^a \approx w_{N_z}^b \equiv w_{N_z} .$$

Predređivanjem sistema jednačina za nepoznate Grinove funkcije, prvo će biti navedene jednačine za G^a funkcije, a zatim za G^b funkcije. Vrste i kolone u determinanti sistema će tada zameniti svoja mesta, pa se dobija:

$$D = \begin{vmatrix} \hat{A}_{N_z+1} & \hat{C}_{N_z+1} \\ \hat{C}_{N_z+1} & \hat{B}_{N_z+1} \end{vmatrix}_{2(N_z+1)} \quad (3.53)$$

gde su:

$$\hat{A}_{N_z+1} = \begin{vmatrix} \varrho - \frac{\Delta}{W_z} \varepsilon_0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \varrho & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \varrho & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \varrho & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \varrho & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \varrho - \frac{\Delta}{W_z} \varepsilon_{N_z} \end{vmatrix}_{N_z+1}$$

$$\hat{B}_{N_z+1} = \begin{vmatrix} \varrho + \frac{\Delta}{W_z} (1 - \chi - \chi \varepsilon_0) & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \varrho + \frac{\Delta}{W_z} (1 - \chi) & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \varrho & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \varrho & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \varrho & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \varrho + \frac{\Delta}{W_z} (1 - \chi) \end{vmatrix}_{N_z+1}$$

$$\hat{C}_{N_z+1} = \begin{vmatrix} R & 1 + w_0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 1 + w_0 & R & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & R & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \dots & R & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & R & 1 + w_{N_z} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 + w_{N_z} & R \end{vmatrix}_{N_z+1}$$

Zakon disperzije

U opštem slučaju uslov $D = 0$ nije analitički rešiv pa se mora pribjeći metodama numeričke analize¹⁷.

Numeričkim izračunavanjem analiziran je uticaj perturbacionih parametara i deblijne (broj slojeva) filma na energetski spektar i stanja elektrona. Pri tome su razmatrane različite vrednosti perturbacionih energetskih parametara ϵ_{0/N_z} i w_{0/N_z} za filmove raznih debljina $N_z \in [3, 13]$ sa $\chi = 0.5$ ($\Delta_b = 0.5\Delta_a$), pri čemu je uzeto $\Delta_a = 6W$ i $W_x = W_y = W_z = W$.

Najpre će biti razmatran uticaj prisustva granica film struktura na energetski spektar. Posmatra se neperturbovan film ($\epsilon_{0/N_z} = w_{0/N_z} = 0$).

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 odgovarajuće beskonačne kristalne 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 (dva donja i dva gornja). To nas dovodi do zaključka da je egzistencija energetskih gepova isključiva posledica ograničenosti film-struktura.

Pošto energetski gepovi i širina zabranjene zone imaju znatan uticaj na fizičke osobine posmatranog sistema [18, 24, 92], ovde će biti posebno analizirani. U tabeli 3.5 data je ova zavisnost. Prikazane su redom najniža i najviša redukovana energija donje dozvoljene energetske zone (\mathcal{E}_d^m i \mathcal{E}_d^M) i najniža i najviša redukovana energija gornje zone (\mathcal{E}_g^m i \mathcal{E}_g^M), kao i širina zabranjene zone (\mathcal{E}_F), pri čemu je $\mathcal{E} = \hbar\omega/W$.

$N_z + 1$	\mathcal{E}_d^m	\mathcal{E}_d^M	\mathcal{E}_g^m	\mathcal{E}_g^M	\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 3.5: Karakteristične energije u filmu sa dve podrešetke

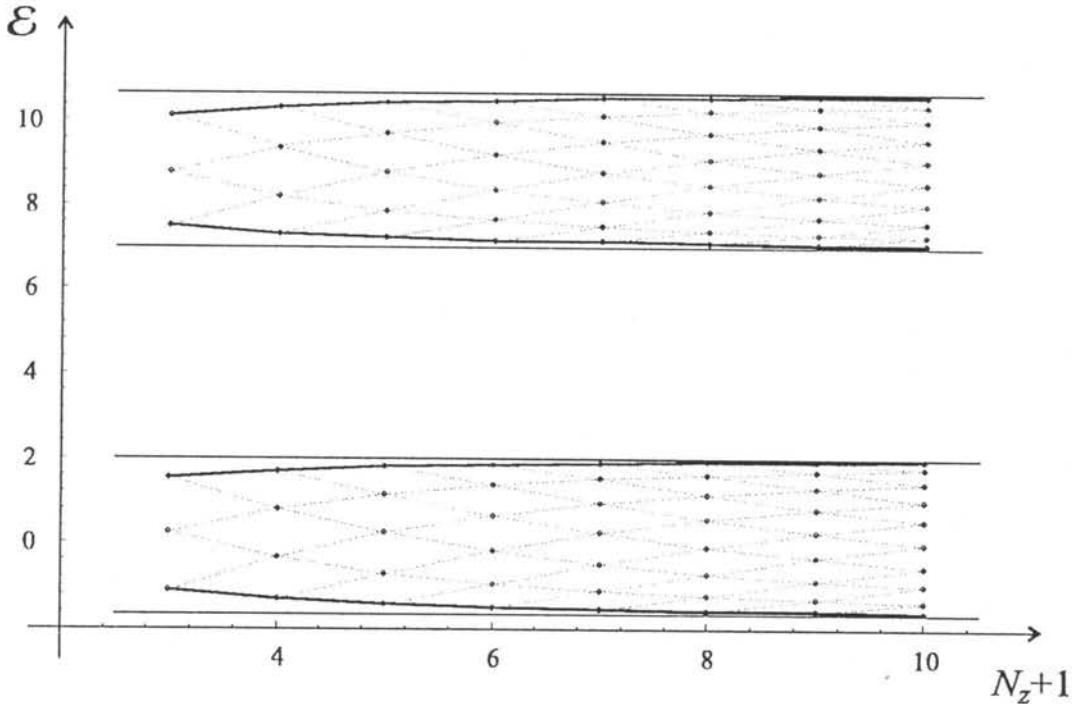
Korišćenjem podataka iz tabele 3.5, kao i podataka iz izraza (2.64) i (2.65) na slici 3.10 je predstavljena zavisnost veličine energetskih gepova i širine zabranjene zone od deblijine posmatranog filma.

Uočava se, kao i kod filma sa primitivnom kubnom rešetkom, opadanje vrednosti donjeg i gornjeg energetskog gepa, pri povećanju deblijine filma. Povećanjem deblijine filma povećavaju se širine dozvoljenih energetskih zona, dok se širina zabranjene energetske zone smanjuje.

Rezultati numeričkih analiza za perturbovan film prikazani su tabelarno i grafički.

Kao i kod filma sa primitivnom kubnom rešetkom, elektronski energetski spektar zavisi od perturbacionih parametara. Povećanjem energije elektrona lokalizovnih na površinskim slojevima - ceo spektar se pomera ka višim energijama, dok se povećanjem energije elektronskog transfera izmedju površinskih slojeva - ceo spektar širi. Na taj način, neka od elektronskih

¹⁷U ovom slučaju čak i za slučaj neperturbovanog filma nije moguće dobiti analitička rešenja.



Slika 3.10: Zavisnost energetskih gepova i širine zabranjene zone od debljine filma

stanja mogu da izadju van najviše i/ili najniže balkovske energetske zone, kao i da se nadju u zabranjenoj zoni idealnog kristala, što se vidi iz tabele 3.6.

Kao primer za to, za date vrednosti parametara: $w_0 = 0.6$, $w_{N_z} = -0.6$, $\epsilon_0 = 0.5$ i $\epsilon_{N_z} = -0.5$ (kao i za $\chi = 0.5$, i $k_x = k_y = 0$, $\Delta^a = 6W_z$), pojavljuju se četiri lokalizovana stanja (dva u zabranjenoj zoni (\mathcal{E}_2 i \mathcal{E}_3), jedno ispod najniže balkovske energije (\mathcal{E}_1) i jedno iznad najviše balkovske energije (\mathcal{E}_4)). U tabeli 3.7 je prikazana zavisnost ovih stanja od debljine filma.

Zabranjena zona je u ovom slučaju uža od balkovske. Pojava lokalizovanih stanja i stanja u zabranjenoj zoni prikazana je na slici 3.11, za sledeće vrednosti perturbacionih parametara: $\epsilon_0 = 0.5$, $\epsilon_{N_z} = -0.5$, $w_0 = 0.4$, $w_{N_z} = -0.6$.

Za odredjene vrednosti parametara, na pr. $w_0 = w_{N_z} = 1$ i $\epsilon_0 = \epsilon_{N_z} = 0.5$, istovremeno mogu da se javi dva (gornja) lokalizovana stanja, oba iznad najviše balkovske granice, ili pak dva (donja) lokalizovana stanja - ispod najniže balkovske granice, npr. za $\epsilon_0 = w_0 = -0.5$ i $\epsilon_{N_z} = w_{N_z} = 0.5$. Njihov položaj takođe zavisi od debljine filma. Za veće vrednosti debljine filma, ta dva stanja se stapaju u jedno, što je i pokazano na slici 3.12. za slučaj gornjih lokalizovanih stanja (isto važi i za donja).

Pored toga, uočeno je (a to se vidi i iz tabele 3.6 i 3.7) da uvek pri pojavi gornjih lokalizovanih stanja dolazi do pojave istog broja stanja u zabranjenoj zoni idealnog kristala, i to, bliže granici donje balkovske dozvoljene zone, dok se pri pojavi donjih lokalizovanih stanja javlja isti broj stanja bliže gornjoj balkovskoj zoni. Ukoliko imamo, npr. dva gornja ili donja lokalizovana stanja, odgovarajuća stanja u zabranjenoj zoni će se sa povećanjem debljine filma ponašati na isti način (povećanjem broja slojeva stapaju se u jedno stanje). To je za slučaj pojave gornjih lokalizovanih stanja i shodno s tim pojave stanja u zabranjenoj zoni (bliže donjoj balkovskoj zoni) prikazano na slici 3.13 ($w_0 = w_{N_z} = 1$ i $\epsilon_0 = \epsilon_{N_z} = 0.5$). Isto važi i za donja lokalizovana i ujima odgovarajuća stanja u zabranjenoj zoni. S druge strane, iz tabele 3.7 se uočava da, ukoliko postoji samo po jedno gornje i/ili donje lokalizovano stanje sa odgovarajućim stanjima u zabranjenoj zoni, povećanjem debljine filma energije tih stanja se udaljavaju od karakterističnih

balkovskih energija, težeći jednoj konstantnoj vrednosti. Na taj način, širina zabranjene zone u filmu poprima jednu odredjenu vrednost već pri $N_z > 5$.

Granični parametri				Spektri elektrona u (petoslojnom $N_z = 4$) filmu									
ϵ_1	w_1	ϵ_2	w_2	Redukovane energije									
				\mathcal{E}_1	\mathcal{E}_2	\mathcal{E}_3	\mathcal{E}_4	\mathcal{E}_5	\mathcal{E}_6	\mathcal{E}_7	\mathcal{E}_8	\mathcal{E}_9	\mathcal{E}_{10}
0.40	0.50	-0.50	-0.60	-1.915	-1.242	-0.077	1.312	2.782	6.254	8.559	9.953	9.953	11.942
			-0.50	-1.963	-1.226	-0.056	1.320	2.782	6.220	7.445	8.576	9.961	11.942
			-0.40	-2.018	-1.210	-0.031	1.331	2.782	6.179	7.458	8.596	9.972	11.942
		-0.25	-0.35	-1.424	-0.904	0.078	1.358	2.782	7.125	7.619	8.678	9.996	11.942
			-0.25	-1.474	-0.924	0.123	1.379	2.782	7.060	7.627	8.718	10.016	11.942
			-0.15	-1.531	-0.940	0.168	1.403	2.782	6.992	7.634	8.760	10.040	11.942
		0.00	-0.10	-1.379	-0.546	0.510	1.515	2.782	7.304	8.093	9.119	10.159	11.942
			0.00	-1.408	-0.599	0.536	1.565	2.782	7.274	8.045	9.150	10.211	11.942
			0.10	-1.442	-0.649	0.559	1.618	2.782	7.241	8.003	9.178	10.268	11.943
		0.25	0.15	-1.379	-0.450	0.881	1.999	2.784	7.333	8.256	9.579	10.804	11.943
			0.25	-1.402	-0.495	0.887	2.070	2.784	7.316	8.218	9.562	10.886	11.944
			0.35	-1.429	-0.540	0.855	2.141	2.785	7.298	8.109	9.547	10.968	11.944
0.50	0.50	-0.50	0.40	-1.388	-0.492	1.006	2.726	2.827	7.351	8.314	9.714	11.889	11.989
			0.50	-1.409	-0.468	0.986	2.749	2.867	7.342	8.286	9.696	11.913	12.038
			0.60	-1.432	-0.506	0.969	2.759	2.918	7.331	8.259	9.678	11.922	12.101
		-0.25	-0.60	-1.916	-1.272	-0.113	1.300	2.843	6.254	7.421	8.529	9.939	12.013
			-0.50	-1.964	-1.256	-0.092	1.309	2.843	6.219	7.432	8.547	9.948	12.013
			-0.40	-2.018	-1.241	-0.066	1.320	2.843	6.179	7.444	8.567	9.959	12.013
		0.00	-0.35	-1.439	-0.926	0.048	1.348	2.843	7.123	7.604	8.652	9.984	12.013
			-0.25	-1.486	-0.950	0.093	1.370	2.843	7.058	7.611	8.692	10.005	12.014
			-0.15	-1.541	-0.971	0.138	1.395	2.843	6.991	7.617	8.743	10.029	12.014
		0.25	-0.10	-1.399	-0.577	0.490	1.510	2.844	7.296	8.072	9.100	10.152	12.014
			0.00	-1.427	-0.632	0.514	1.560	2.844	7.268	8.024	9.130	10.200	12.014
			0.10	-1.458	-0.683	0.536	1.614	2.844	7.235	7.981	9.156	10.260	12.014
		0.50	0.15	-1.400	-0.485	0.861	1.999	2.845	7.324	8.230	9.560	10.800	12.015
			0.25	-1.422	-0.532	0.846	2.070	2.845	7.308	8.193	9.542	10.880	12.015
			0.35	-1.447	-0.577	0.833	2.141	2.846	7.290	8.155	9.526	10.97	12.020
		0.60	0.40	-1.409	-0.467	0.987	2.749	2.867	7.432	8.287	9.696	11.910	12.037
			0.50	-1.428	-0.506	0.967	2.789	2.889	7.332	8.260	9.667	11.960	12.063
			0.60	-1.450	-0.545	0.948	2.811	2.928	7.322	8.232	9.659	11.980	12.112
0.60	0.60	-0.50	-0.60	-1.916	-1.305	-0.149	1.289	2.905	6.254	7.407	8.501	9.927	12.087
			-0.50	-1.964	-1.290	-0.127	1.299	2.905	6.219	7.417	8.518	9.936	12.087
			-0.40	-2.019	-1.276	-0.101	1.310	2.905	6.179	7.429	8.539	9.947	12.087
		-0.25	-0.35	-1.457	-0.949	0.018	1.339	2.905	7.120	7.588	8.625	9.973	12.087
			-0.25	-1.501	-0.978	0.064	1.361	2.905	7.057	7.594	8.666	9.994	12.087
			-0.15	-1.552	-1.002	0.109	1.387	2.905	6.999	7.599	8.708	10.019	12.087
		0.00	-0.10	-1.423	-0.609	0.471	1.505	2.905	7.288	8.050	9.082	10.145	12.087
			0.00	-1.448	-0.665	0.494	1.555	2.905	7.261	8.002	9.110	10.198	12.087
			0.10	-1.477	-0.717	0.514	1.610	2.905	7.229	7.957	9.135	10.257	12.087
		0.25	0.15	-1.424	-0.522	0.843	1.998	2.906	7.134	8.204	9.541	10.802	12.088
			0.25	-1.444	-0.569	0.827	2.069	2.906	7.299	8.166	9.523	10.884	12.088
			0.35	-1.467	-0.615	0.813	2.141	2.906	7.282	8.128	9.506	10.967	12.088
		0.50	0.40	-1.432	-0.506	0.969	2.759	2.918	7.331	8.259	9.678	11.922	12.101
			0.50	-1.450	-0.545	0.948	2.811	2.928	7.322	8.232	9.658	11.982	12.112
			0.60	-1.471	-0.585	0.929	2.851	2.949	7.313	8.205	9.640	12.029	12.139

Tabela 3.6: Zavisnost energije elektrona od graničnih parametara

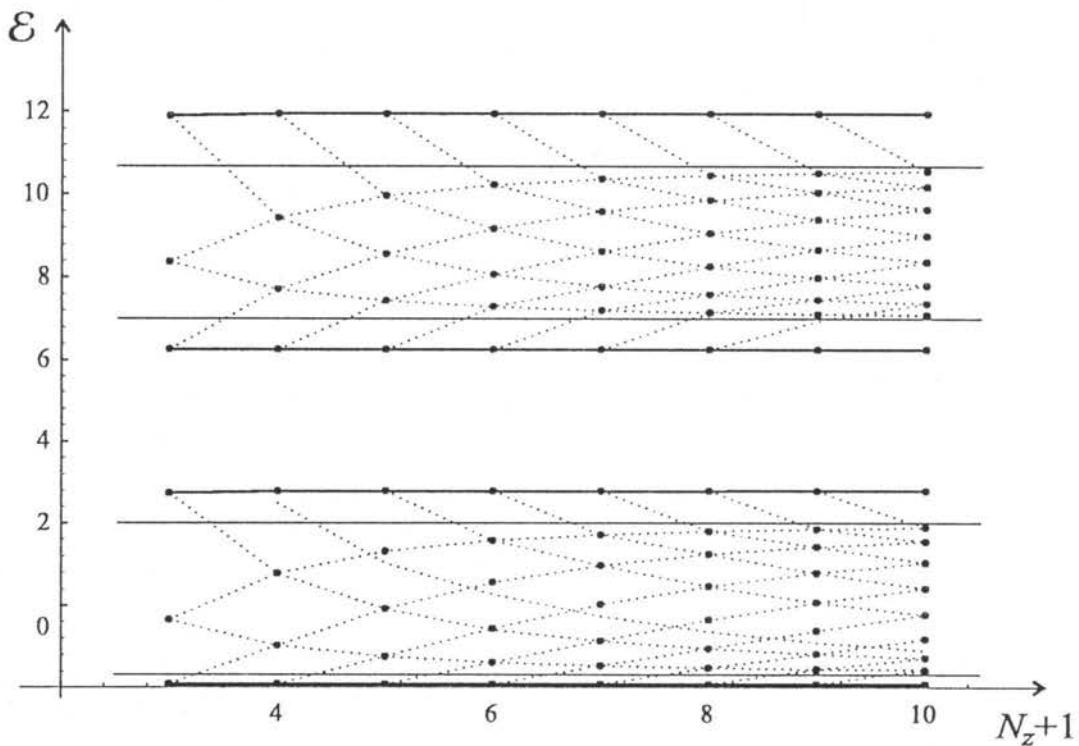
Širina zabranjene energetske zone zavisi od vrednosti perturbacionih energetskih parametara. Povećanjem energije elektronskog transfera u površinskim slojevima (parametri w_{0/N_z}) širina zabranjenog energetske zone se smanjuje. Ukoliko energija elektrona lokalizovanih na površinskom slojevima (duž z pravca) nije perturbovana: $\epsilon_{0/N_z} = 0$, onda je širina zabranjenog energetskog geja maksimalna (pri fiksnoj vrednosti elektronskog transfera). Ta zavisnost prikazana je na slici sliči 3.14 ($\epsilon_{0/N_z} = \epsilon$ i $w_{0/N_z} = w$).

Ukoliko ovaj model filma posmatramo kao slabi poluprovodnik onda je primenjena jednočestična aproksimacija opravdana (primena jednočestične aproksimacije na sisteme tankih filma slabih poluprovodnika, sačinjenih od dve vrste atoma, kao što su GaN ili AlN je dala

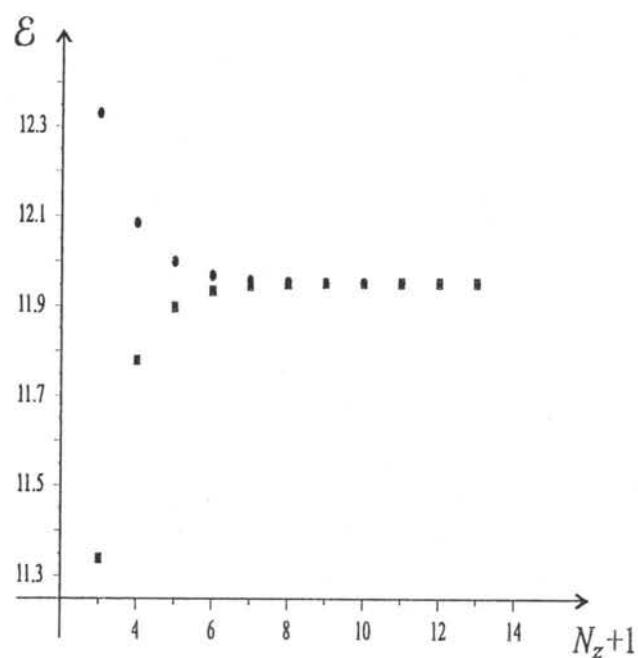
dobra slaganja sa eksperimentom) [38,39,103]. Kod ovih poluprovodnika pokazano je da se provodna energetska zona cepa na dve podzone kao u našem modelu [104]. Za jednočestična stanja interakcija sa transferzalnim elektromagnetskim poljem, tj. sa fizičkim fotonima, dovodi do porasta širine podzona i medjuzonskih prelaza. Ovaj medjuzonski prelaz je upravo uslovjen ograničenošću film-strukture.

$N_z + 1$	\mathcal{E}_1	\mathcal{E}_2	\mathcal{E}_3	\mathcal{E}_4
3	-1.915	2.8544	6.2558	12.0338
4	-1.916	2.900	6.255	12.082
5	-1.9165	2.9046	6.2542	12.0867
6	-1.9166	2.9051	6.2541	12.0872
7	-1.9167	2.9051	6.2514	12.0872
8	-1.9167	2.9051	6.2514	12.0872
9	-1.9167	2.9051	6.2514	12.0872
10	-1.9167	2.9051	6.2514	12.0872
11	-1.9167	2.9051	6.2514	12.0872
12	-1.9167	2.9051	6.2514	12.0872
13	-1.9167	2.9051	6.2514	12.0872

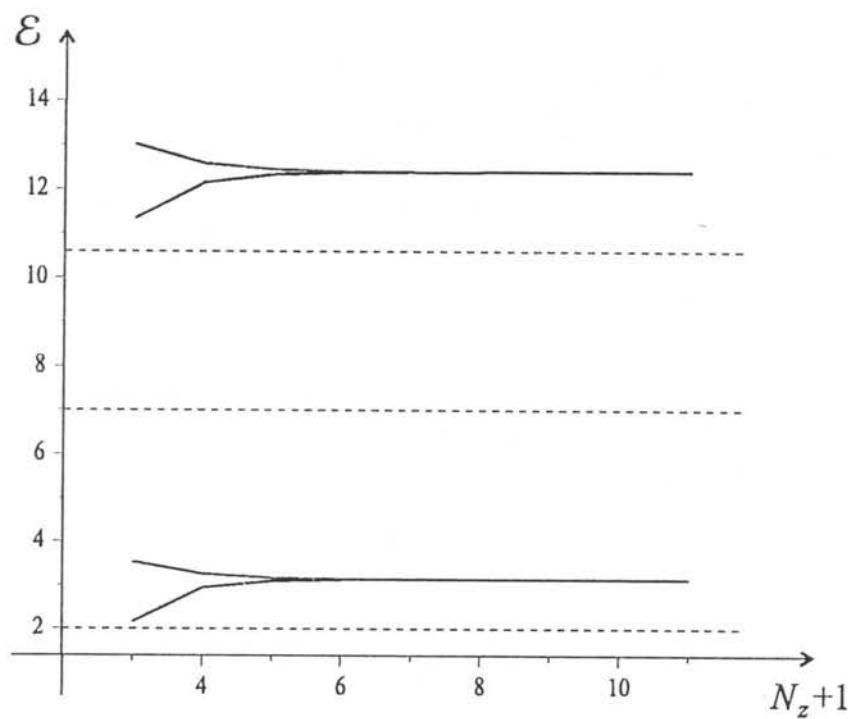
Tabela 3.7: Zavisnost lokalizovanih stanja od debljine filma



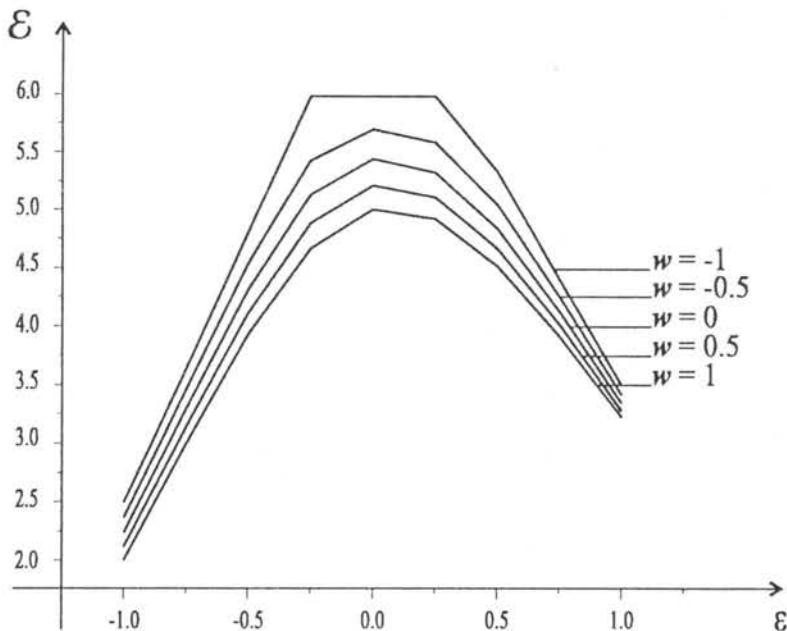
Slika 3.11: Suženje zabranjene zone i pojava lokalizovanih stanja



Slika 3.12: Položaj lokalizovanih stanja u funkciji debljine filma



Slika 3.13: Položaj lokalizovanih stanja i stanja u zabranjenoj zoni u funkciji debljine filma



Slika 3.14: Zavisnost širine zabranjene zone od perturbacionih parametara

Formiranjem različitih legura npr. *GaN* i *GaAs* ili *AlN* i *AlAs* može se, u principu, uticati na veličinu gepa izmedju nitrida i arsenida omogućujući proizvodnju emitera svetlosti (na bazi III-V jedinjenja) koji pokrivaju ceo spektar [103]. Na taj način, promenom parametara može se uticati na širinu zabranjene zone, a samim tim i na optičke osobine tankih filmova [104,105].

3.2 Prostorna raspodela elektrona u tankim filmovima

U cilju analize prostorne raspodele elektrona, tj. verovatnoća nalaženja elektrona na pojedinih slojevima filma, potrebno je izračunati Grinove funkcije, a preko njih spektralne težine pojedinih energetskih stanja elektrona. Polazi se od sistema jednačina (3.17) za film sa primitivnom kubnom rešetkom i (3.50) i (3.51) za film sa složenom rešetkom, koje je sada najpogodnije predstaviti u matričnom obliku:

$$\hat{D}\tilde{\mathcal{G}} = \tilde{\mathcal{K}}, \quad (3.54)$$

gde su: \hat{D} matica koja dogovara determinanti (3.19) reda $N_z + 1$ - za film sa primitivnom rešetkom, i determinanti (3.53) za film sa podrešetkom koja je u ovom slučaju reda $2(N_z + 1)$, dok su $\tilde{\mathcal{G}}$ i $\tilde{\mathcal{K}}$ vektori Grinovih funkcija i Kronekerovih delta [72,105]:

$$\tilde{\mathcal{G}} = \begin{pmatrix} G_{0,m_z} \\ G_{1,m_z} \\ \vdots \\ \vdots \\ G_{n_z,m_z} \\ \vdots \\ \vdots \\ G_{N_z,m_z} \end{pmatrix}, \quad \tilde{\mathcal{K}} = \frac{i\hbar}{2\pi W_z} \begin{pmatrix} \delta_{0,m_z} \\ \delta_{1,m_z} \\ \vdots \\ \vdots \\ \delta_{n_z,m_z} \\ \vdots \\ \vdots \\ \delta_{N_z,m_z} \end{pmatrix}.$$

Dejstvom inverzne matrice $\hat{\mathcal{D}}^{-1}$ dobijamo:

$$\tilde{\mathcal{G}} = \hat{\mathcal{D}}^{-1} \tilde{\mathcal{K}} . \quad (3.55)$$

Kako se inverzna matrica može izraziti preko adjungovane, čiji su članovi D_{ik} kofaktori elemenata d_{ik} direktnе matrice [106], može se pisati:

$$G_{n_z, m_z} = \frac{1}{D} \sum_q D_{n_z, q} K_{q, m_z} = \frac{1}{D} \frac{i\hbar}{2\pi W_z} \sum_q D_{n_z, q} \delta_{q, m_z} . \quad (3.56)$$

Kronekerova δ skida sumu i pri tome izjednačuje indekse q i m_z . Za Grinovu funkciju se tako dobija:

$$G_{n_z, m_z} = \frac{i\hbar}{2\pi W_z} \frac{D_{n_z, m_z}}{D} . \quad (3.57)$$

Kofaktori D_{n_z, m_z} se izračunavaju na osnovu poznavanja odgovarajućih determinanti D datih izrazima (3.19) i (3.53). Kako su za ravnotežene procese bitne samo dijagonalne Grinove funkcije G_{n_z, n_z} , izračunavanje kofaktora D_{n_z, m_z} se znatno pojednostavljuje.

3.2.1 Film sa primitivnom kubnom rešetkom

U ovom slučaju kofaktori se izražavaju preko proizvoda dve pomoćne determinante:

$$D_{n_z, m_z} = B_{n_z} B_{N_z - n_z} , \quad (3.58)$$

gde su:

$$B_{n_z}(\varrho) = \begin{vmatrix} \varrho - \frac{\Delta}{W} \varepsilon_1 & 1 + w_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 1 + w_1 & \varrho & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \varrho & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \varrho & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & \varrho & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & \varrho \end{vmatrix}_{n_z} \quad (3.59)$$

$$B_{N_z - n_z}(\varrho) = \begin{vmatrix} \varrho & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & \varrho & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \varrho & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \varrho & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & \varrho & 1 + w_2 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 + w_2 & \varrho - \frac{\Delta}{W} \varepsilon_2 \end{vmatrix}_{N_z - n_z} \quad (3.60)$$

s tim da je $B_0 = B_{N_z - N_z} = 1$.

U slučaju idealnog (neperturbovanog) filma, pomoćne determinante B_{n_z} i $B_{N_z - n_z}$ se svode na Čebiševljeve polinome P_{n_z} i $P_{N_z - n_z}$. Tada je Grinova funkcija idealnog filma [105]:

$$G_{n_z; n_z} = \frac{i\hbar}{2\pi W} \frac{P_{n_z} P_{N_z - n_z}}{P_{N_z + 1}} . \quad (3.61)$$

U opštem slučaju, vrednost pomoćnih determinanti se može naći numerički, dok su Grinove funkcije perturbovanog filma [72]:

$$G_{n_z; n_z} = \frac{i\hbar}{2\pi W} \frac{B_{n_z} B_{N_z - n_z}}{\mathcal{D}_{N_z + 1}} \quad (3.62)$$

multipolne, jer se u imeniku nalazi polinom $\mathcal{D}_{N_z + 1}$ reda $N_z + 1$. Stoga se mora pribeci faktorizaciji na proste polove [21, 72, 102]:

$$G_{n_z; n_z} = \frac{i\hbar}{2\pi W} \sum_{\nu=1}^{N_z+1} \frac{g_{n_z; n_z}(\varrho_\nu)}{\varrho - \varrho_\nu}. \quad (3.63)$$

Spektralne težine $g_{n_z; n_z}(\varrho_\nu)$ su date izrazom:

$$g_{n_z; n_z} = \frac{B_{n_z}(\varrho_\nu) B_{N_z - n_z}(\varrho_\nu)}{\frac{d}{d\varrho} \mathcal{D}_{N_z + 1}(\varrho)|_{\varrho=\varrho(\nu)}}, \quad (3.64)$$

dok je za idealni (neperturbovani) film:

$$g_{n_z; n_z} = \frac{\mathcal{P}_{n_z}(\varrho_\nu) \mathcal{P}_{N_z - n_z}(\varrho_\nu)}{\frac{d}{d\varrho} \mathcal{P}_{N_z + 1}(\varrho)|_{\varrho=\varrho(\nu)}}. \quad (3.65)$$

Spektralne težine Grinovih funkcija predstavljaju kvadrat modula talasne funkcije elektrona [34, 35] i omogućuju određivanje prostorne distribucije, odnosno verovatnoće nalaženja elektrona po slojevima kristalnog filma. Time je dat jasan kriterijum za razlikovanje kolektivnih, zapreminskih (balk) eksitacija (koje su opisane stojećim talasima i imaju približno istu verovatnoću nalaženja duž celog preseka filma) od lokalizovanih, površinskih¹⁸, eksitacija (čije spektralne težine pokazuju oštar maksimum na površinskom perturbovanom sloju i naglo opadaju ka unutrašnjosti filma). Uobičajena periodična zavisnost u obliku ravnog talasa e^{ikn} za zapreminska stanja, postaje opadajuća eksponencijalna zavisnost $e^{-\kappa n}$ za lokalizovana stanja, gde je osnovni uslov $\kappa \geq 0$ [107]. Kao što je napred rečeno, uslov da talasni vektor κ poprimi imaginarnе vrednosti $\kappa = -ik$, svodi se na uslov $|\varrho| \geq 2$ [92], koji ukazuje na to da se energije lokalizovanih stanja nalaze van kontinualne zone balkovskih elektronskih energija.

U idealnom filmu egzistiraju samo zapreminska eksitonska stanja. Verovatnoće nalaženja se mogu naći analitički. Korišćenjem pravila za izvod determinante [106], dobija se:

$$\left[\frac{d}{d\varrho} \mathcal{P}_{N_z + 1}(\varrho) \right]_{\varrho=\varrho_\nu} = \sum_{i=1}^{N_z+1} \mathcal{P}_{i-1}(\varrho_\nu) \mathcal{P}_{N_z+1-i}(\varrho_\nu) = \sum_{i=1}^{N_z+1} \frac{\sin i\xi_\nu \sin(N_z + 2 - i)\xi_\nu}{\sin^2 \xi_\nu}, \quad (3.66)$$

a spektralne težine postaju:

$$g_{n_z; n_z}(\varrho_\nu) = \frac{\sin(n_z + 1)\xi_\nu \sin(N_z - n_z + 1)\xi_\nu}{\sum_{i=1}^{N_z+1} \sin i\xi_\nu \sin(N_z + 2 - i)\xi_\nu}. \quad (3.67)$$

¹⁸Egizstenciju površinskih stanja prvi je demonstrirao Tami 1932. [18]. Na primeru polubeskonačnog kristala, on je pokazao da prisustvo površine može dovesti do pojave diskretnih energetskih nivoa koji leže van kontinualne zone dozvoljenih elektronskih energija masivnog kristala. Ovim nivoima energije odgovaraju kompleksne vrednosti kvaziimpulsa, tako da su talasne funkcije monotono (ili oscilatorno) prigušene unutar kristala. To znači da su elektroni sa ovim energijama lokalizovani u blizini površine kristala pa se nazivaju površinskim nivoima (lokalizovana stanja).

Uvodjenjem smene $\xi_\nu = \frac{\pi\nu}{N_z + 2}$ sledi:

$$g_{n_z; n_z} = \frac{\sin^2(n_z + 1)\xi_\nu}{\sum_{i=1}^{N_z+1} \sin^2 i\xi_\nu}, \quad (3.68)$$

suma u imenici se može rešiti primenom poznatog razvoja u red [80]:

$$\sum_{k=1}^m \sin^2 kx = \frac{m}{2} - \frac{\cos(m+1)x \sin mx}{2 \sin x}, \quad (3.69)$$

te se dobija:

$$\sum_{i=1}^{N_z+1} \sin^2 i\xi_\nu = \frac{N_z + 2}{2}. \quad (3.70)$$

Verovatnoće nalaženja elektrona su tada:

$$g_{n_z; n_z} = \frac{2}{N_z + 2} \sin^2 \left[(n_z + 1) \frac{\pi\nu}{N_z + 2} \right]. \quad (3.71)$$

Isti rezultat se dobija primenom metoda talasnih funkcija [29,30,79]. U tabeli 3.8 date su vrednosti spektralnih funkcija za idealni petoslojni film, dok je prostorna raspodela prikazana na slici 3.15a (petoslojni) i 3.15b (šestoslojni).

ν	n_z				
	0	1	2	3	4
1	0. 083	0. 250	0. 333	0. 250	0. 083
2	0. 250	0. 250	0. 000	0. 250	0. 250
3	0. 333	0. 000	0. 333	0. 000	0. 333
4	0. 250	0. 250	0. 000	0. 250	0. 250
5	0. 083	0. 250	0. 333	0. 250	0. 083

Tabela 3.8: Verovatnoće nalaženja elektrona u idealnom petoslojnem filmu

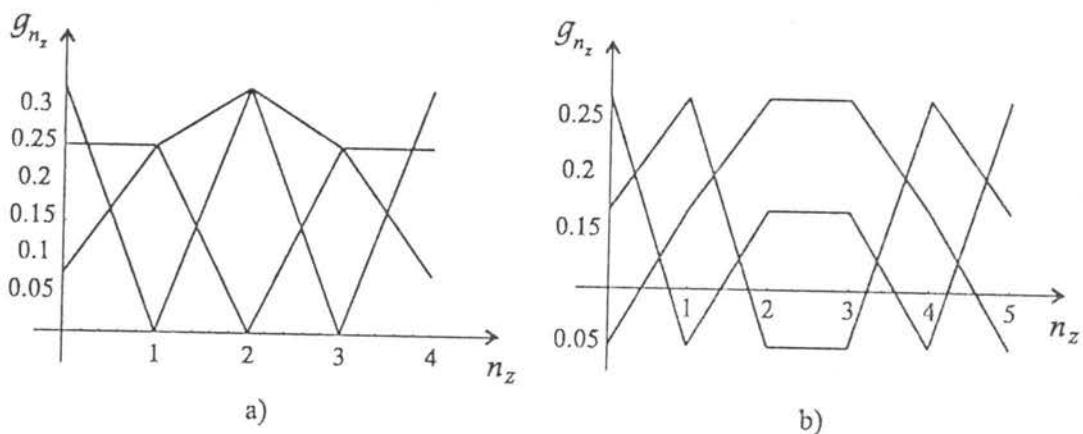
Iz tabele 3.8 se uočava da se na svakom čvoru kristalnog sloja nalazi tačno jedan elektron, koji može biti u $N_z + 1 = 5$ različitim energetskih stanja, sa različitim verovatnoćama nalaženja. Za proizvoljan broj slojeva filma ($N_z + 1$) važi sledeća relacija:

$$\sum_{\nu=1}^{N_z+1} \sum_{n_z=0}^{N_z} g_{n_z; n_z} (\varrho_\nu) = N_z + 1, \quad (3.72)$$

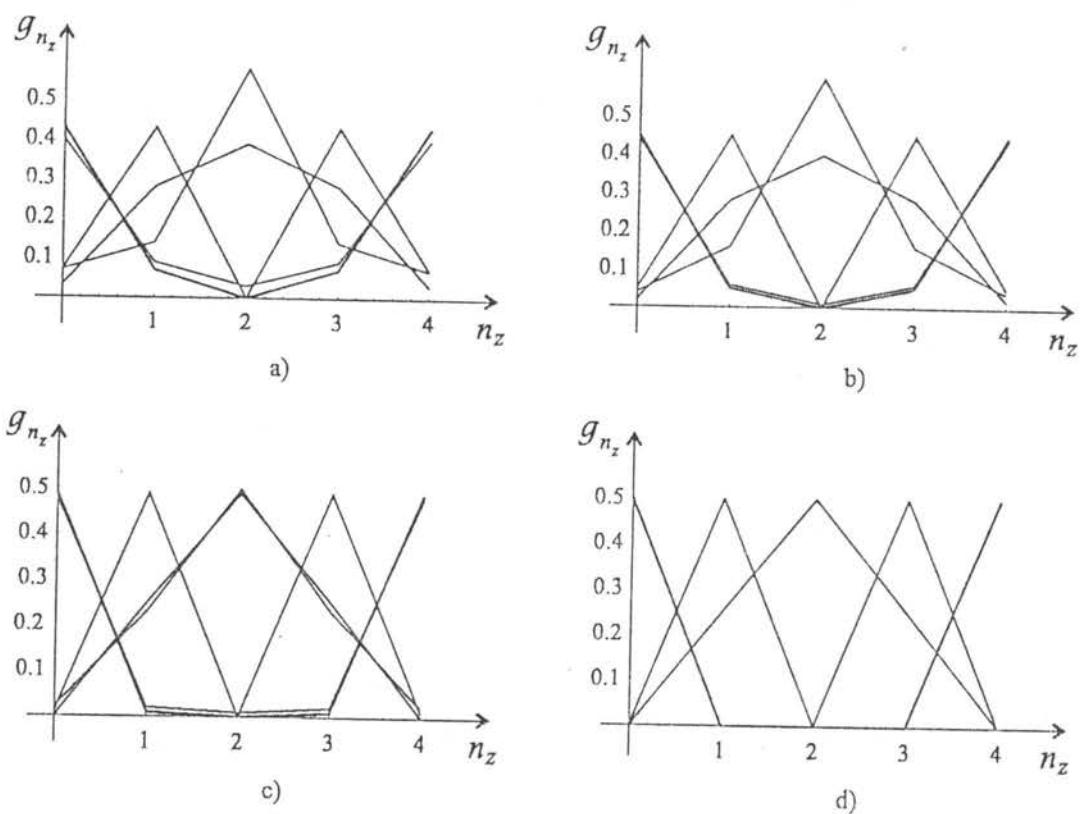
koja ukazuje na to da je zbir svih verovatnoća nalaženja elektrona jednak broju mogućih stanja.

U slučaju površinski perturbovanog filma, spektralne težine za date elektronske energije se mogu naći samo numeričkim metodama. Rezultati dobijeni za razne slučajeve¹⁹ petoslojnog perturbovanog filma dati su na slici 3.16a-d za simetrično perturbovan film i slici 3.17a,b za asimetrično perturbovan film (pri čemu je $k_x = k_y = 0$).

¹⁹Treba napomenuti da je ovde perturbacija elektronske energije uračunata preko parametara $\varepsilon_{1/2}$, a ne $(\Delta/W)\varepsilon_{1/2}$, kao kod analize spektara, da bi se lakše uočili karakteristični rezultati.



Slika 3.15: Spektralne težine elektrona po slojevima idealnog filma



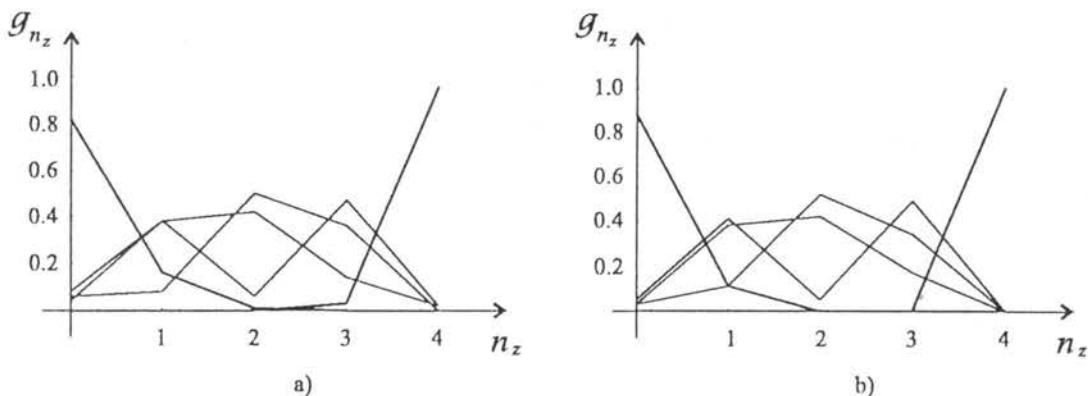
Slika 3.16: Spektralne težine elektrona po slojevima perturbovanog filma (simetrični slučaj)

$$a: \frac{\Delta}{\bar{W}}\epsilon_{1/2} = w_{1/2} = 0.5 \quad b: \frac{\Delta}{\bar{W}}\epsilon_{1/2} = w_{1/2} = 0.75$$

$$c: \frac{\Delta}{\bar{W}}\epsilon_{1/2} = w_{1/2} = -0.5 \quad d: \frac{\Delta}{\bar{W}}\epsilon_{1/2} = w_{1/2} = -0.75$$

Jasno se uočava da su verovatnoće nalaženja elektrona u energetskim stanjima van balkovske energetske zone ($|\mathcal{G}| > 2$), maksimalne na površinama perturbovanog filma. U slučaju simetričnog filma, lokalizovano stanje se javlja jednako na obe površine (sa verovatnoćama nalaženja preko 40%), dok se kod asimetričnog filma, dato lokalizovano stanje javlja samo na jednoj površini (sa verovatnoćom oko 90%). Bitno je naglasiti da se tada, osim lokalizovanog elektronskog stanja, balkovska stanja na površinama skoro i ne pojavljaju.

Nalaženje spektralnih težina omogućava izračunavanje gustine elektronskih stanja (koja ima lokalni karakter), a pomoću nje i Fermijeve energije [72]. Ispitivanjem ovih veličina u kristalnim filmovima [72, 79, 83] uočena je bitna razlika u odnosu na masivne uzorke. Ove veličine zavise kako od graničnih parametara, tako i od debljine filma.



Slika 3.17: Spektralne težine elektrona po slojevima perturbovanog filma (asimetrični slučaj)

$$\text{a: } \frac{\Delta}{W}\epsilon_1 = w_1 = 0.5; \frac{\Delta}{W}\epsilon_2 = w_2 = -0.5 \quad \text{b: } \frac{\Delta}{W}\epsilon_1 = w_1 = 0.75; \frac{\Delta}{W}\epsilon_2 = w_2 = -0.75$$

3.2.2 Film-struktura sa dve podrešetke

U slučaju film-strukture sa složenom kristalnom rešetkom, sličnim postupkom kao u prethodnom slučaju, faktorizacijom na proste polove se dobija:

$$G_{n_z;n_z} = \frac{i\hbar}{2\pi W} \sum_{\nu=1}^{2(N_z+1)} \frac{g_{n_z;n_z}(\varrho_\nu)}{\varrho - \varrho_\nu}. \quad (3.73)$$

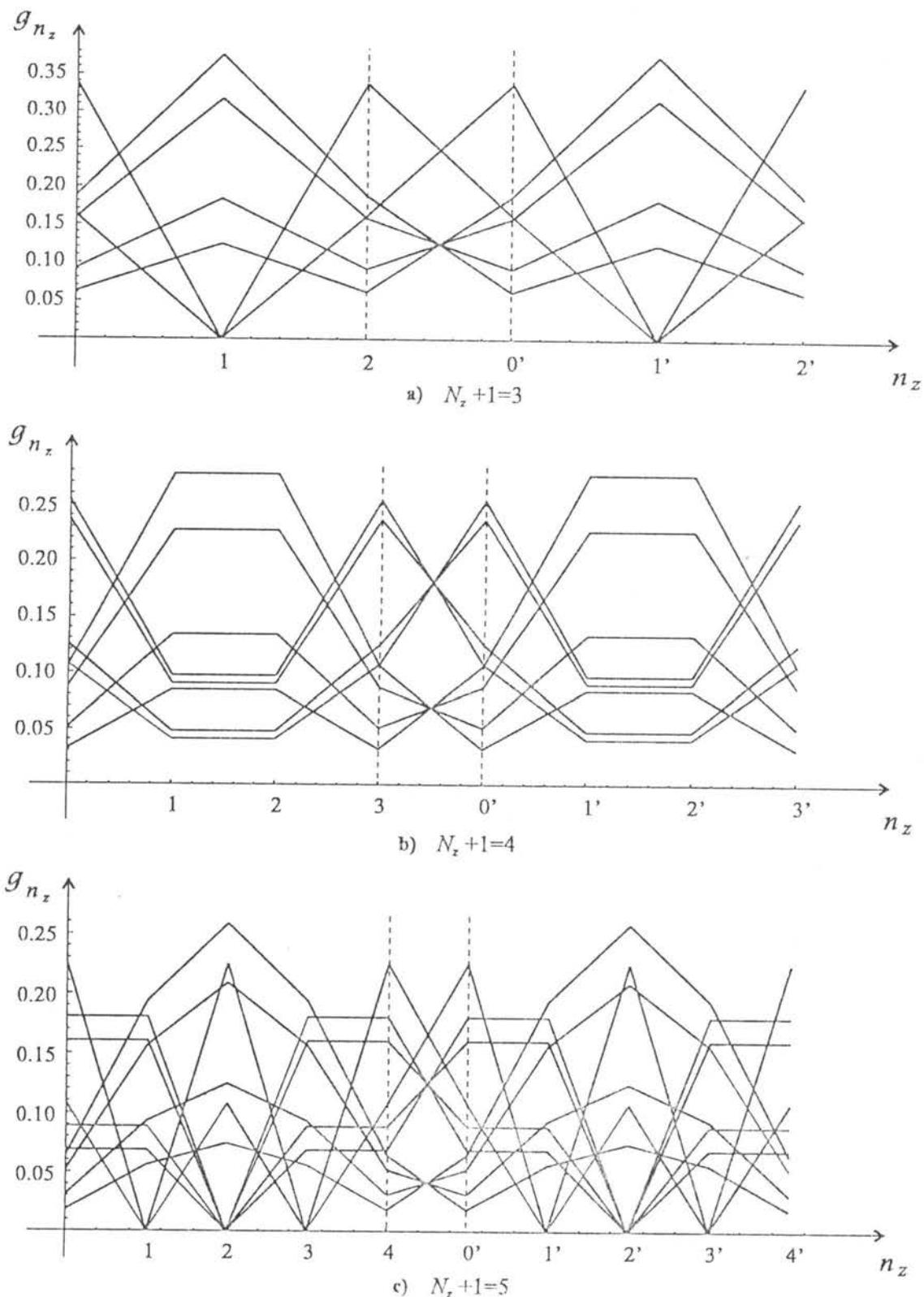
Na taj način, spektralne težine $g_{n_z;n_z}(\varrho_\nu)$ se izražavaju kao:

$$g_{n_z;n_z} = \frac{D_{n_z;n_z}(\varrho_\nu)}{\frac{d}{d\varrho} D(\varrho)|_{\varrho=\varrho(\nu)}} \quad (3.74)$$

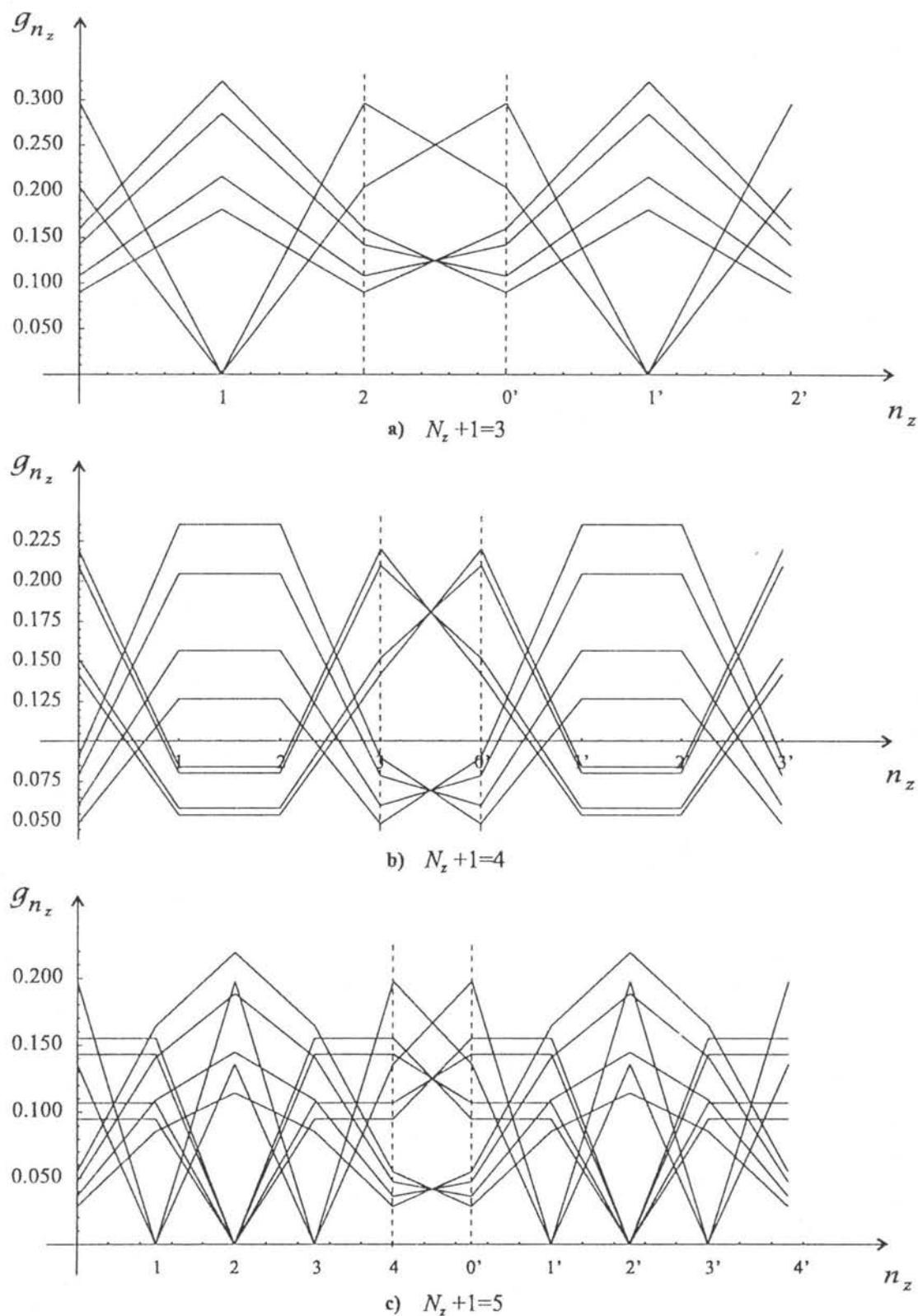
i zadovoljavaju sledeća pravila sumiranja:

$$\sum_{n_z=0}^{N_z} \sum_{j \in \{a,b\}} g_{n_z;n_z}^j(\varrho_\nu) = 1; \quad \sum_{\nu=1}^{N_z+1} \sum_{j \in \{a,b\}} g_{n_z;n_z}^j(\varrho_\nu) = 1.$$

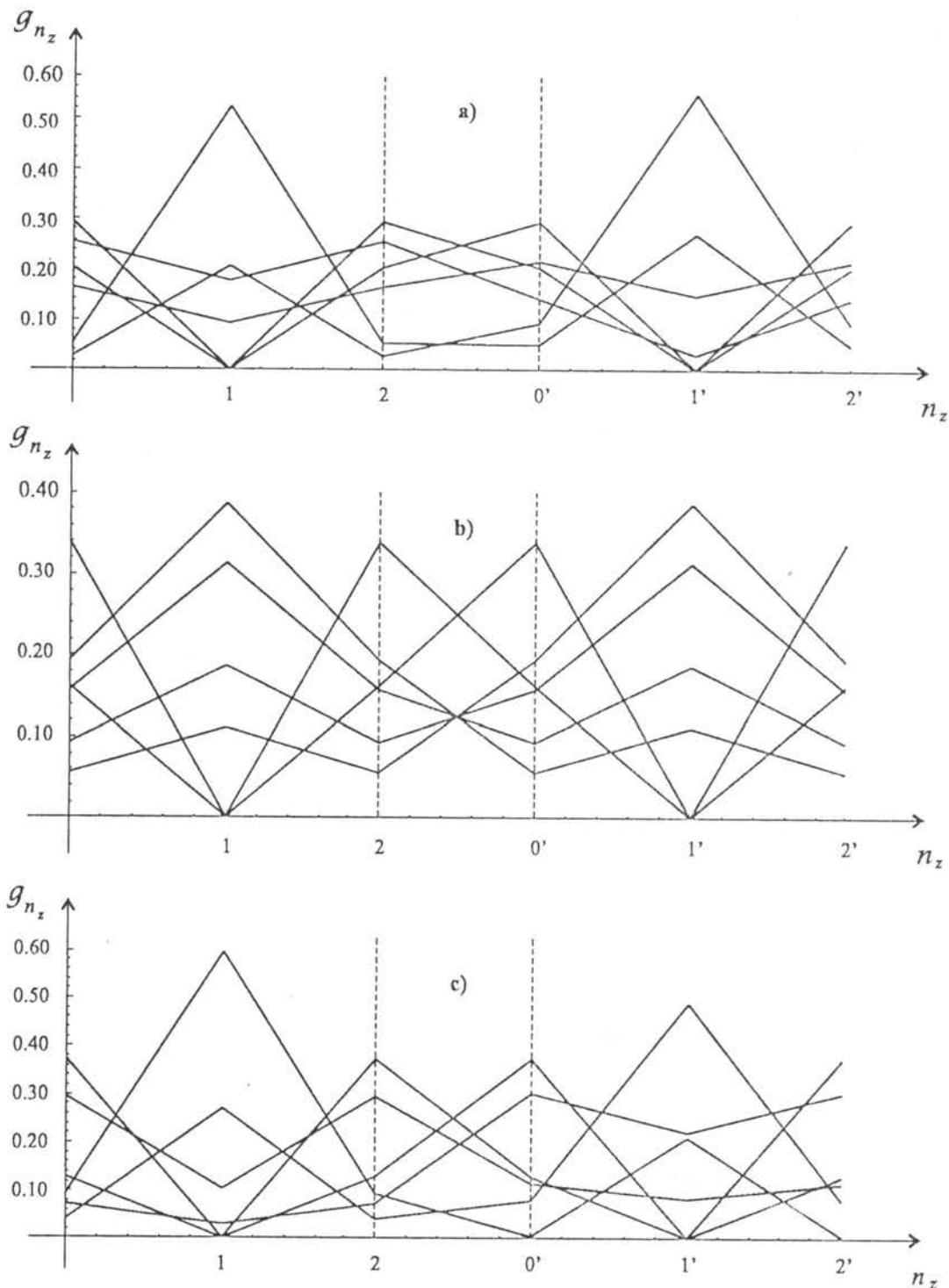
Spektralne težine su u ovom slučaju izračunate numeričkim putem za filmove različitih debljina $N_z + 1 \in \{3, 4, 5\}$ i razne vrednosti perturbacionih parametara. Pri tome je uzeto $k_x = k_y = 0$, $\Delta_a = 6W_z$ i $\chi = 0.5$, kao i $\chi = 0.75$ za slučaj neperturbovanog filma. Rezultati analiza prikazani su grafički (sl.3.18-21).



Slika 3.18: Spektralne težine elektrona po slojevima idealnog filma sa složenom rešetkom ($\chi = 0.5$)



Slika 3.19: Spektralne težine elektrona po slojevima idealnog filma sa složenom rešetkom ($\chi = 0.75$)

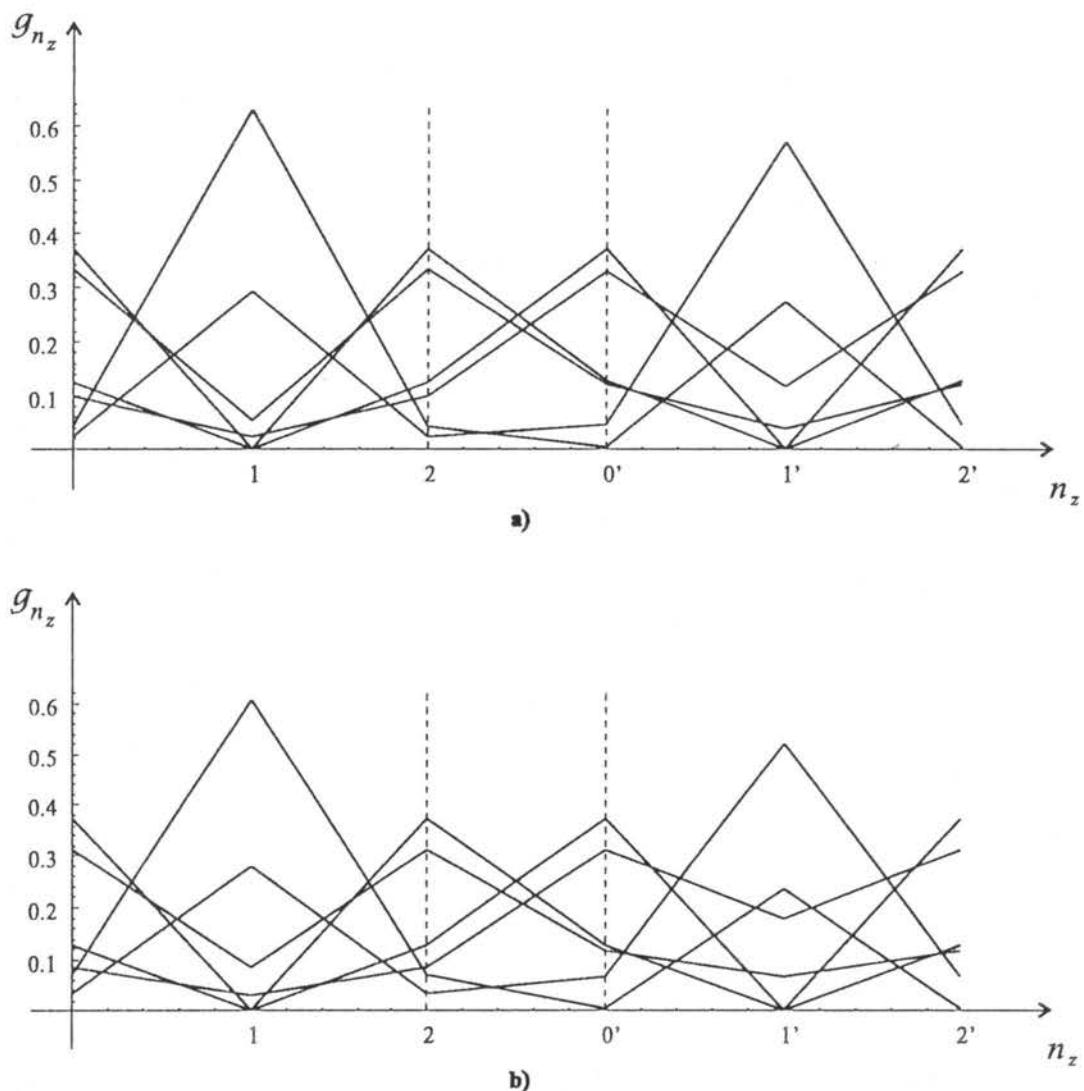


Slika 3.20: Spektralne težine elektrona po slojevima perturbovanog filma sa složenom rešetkom

$$\text{a): } \epsilon_0/N_z = -0.5; \quad w_0/N_z = 0.5$$

$$\text{b): } \epsilon_0/N_z = 0.0; \quad w_0/N_z = 0.5$$

$$\text{c): } \epsilon_0/N_z = 0.5; \quad w_0/N_z = 0.5$$



Slika 3.21: Spektralne težine elektrona po slojevima perturbovanog filma sa složenom rešetkom

$$\text{a): } \epsilon_0/N_z = 0.5 ; \quad w_0/N_z = -0.5$$

$$\text{b): } \epsilon_0/N_z = 0.5 ; \quad w_0/N_z = 0.0$$

Analizom prostorne raspodele elektrona takođe se vidi da broj dozvoljenih stanja raste sa povećanjem broja slojeva, odnosno da je taj broj jednak $2(N_z + 1)$. Pri tome oblik funkcije prostorne raspodele ostaje očuvan za parne N_z , s jedne strane i neparne N_z , s druge strane. Pored toga, sa prikazanih grafika, uočene su i sledeće zakonitosti.

- Kod neperturbovanog filma prostorna raspodela je ista (simetrična) u oba niza atoma, što je prikazano na slici 3.18a-c za parametar $\chi = 0.5$ i slici 3.19a-c za $\chi = 0.75$. Pri tome sva stanja su zapreminska, odnosno, ne uočava se pojava lokalizovanih stanja. Povećanjem broja slojeva, verovatnoće nalaženja stanja sa najvišim i najnižim energijama se smanjuju, u oba niza atoma. S druge strane, povećanjem parametra χ maksimumi verovatnijih stanja se smanjuju.
- U slučaju perturbovanog filma, oblik prostorne raspodela zavisi od perturbacionih parametara. Zavisnosti prostorne raspodele od perturbacije energije elektrona na površinskim slojevima prikazana je na slici 3.20a-c, dok je zavisnost od perturbacije medjuelektronskog transfera prikazana na slici 3.21a,b.
- Vidi se da za neke vrednosti parametara pojavljuju stanja čija je verovatnoća najveća na graničnim slojevima i opada ka unutrašnjosti (to su ustvari, stanja koja u energetskom spektru izlaze van granica energetske zone idelanog kristala), pa su to lokalizovana stanja. Ukoliko je energija na površinskim slojevima neperturbovana (parametri $\epsilon_0/N_z = 0$) prostorna raspodela je simetrična kao kod neperturbovanog filma, bez obzira na medjuelektronski transfer. U ovom slučaju nije uočena pojava lokalizovanih stanja (slika 3.20b). U ostalim slučajevima nema simetrije, pa je uvek jedan niz atoma (jedna podreška) favorizovan u odnosu na drugi. Tako na primer, pri istom transferu elektrona, pri energiji elektrona manjoj od balkovske, u nizu koji počinje atomom na sloju $n_z = N_z$ je veća verovatnoća nalaženja elektrona, a za energije jače od balkovske favorizovan je prvi niz atoma na sloju $n_z = 0$.
- Pored toga, uočena je ogledalska simetrija u obliku prostorne raspodele za prvi i drugi niz atoma. To znači da uvek pri pojavi gornjih lokalizovanih stanja (za najviše energije, odnosno koje leže iznad najviše balkovske energije) dolazi do pojave istog broja stanja u zabranjenoj zoni (bliže prvoj dozvoljenoj zoni), a pri pojavi donjih lokalizovanih stanja (ispod najniže balkovske energije) javljaju se i stanja u zabranjenoj zoni (bliže gornjoj dozvoljenoj zoni).
- Ukoliko se energija elektrona poveća za neku vrednost, u odnosu na balkovsku, prostorna raspodela elektrona za najviše energije biće ogledalski simetrična sa prostornom raspodelom za najniže energije filma kod koga je energija smanjena za tu istu vrednost (naravno, važi i obrnuto). Imajući u vidu prethodno opisanu ogledalsku simetriju, u okviru istog filma, sledi da će stanja sa najnižim energijama prvog niza jednog filma imati isti oblik prostorne raspodele kao i stanja sa najvišim energijama prvog niza drugog filma (isto važi i za drugi niz atoma).
- Povećanjem transfera, pri istoj energiji elektrona (slike 3.20b i 3.21a,b), verovatnoće nalaženja lokalizovanih stanja se smanjuju (kako gornjih tako i donjih), što znači da se sa povećanjem transfera smanjuje verovatnoća pojavljivanja stanja sa energijama iznad ili ispod balkovske zone. Pored toga smanjuju se i verovatnoće zapreminskih stanja.

3.3 Termodinamika tankih filmova

U prethodnim razmatranjima elektronskih svojstava kristalnih filmova analiziran je uticaj graničnih energetskih parametara i debljine filma na energetski spektar elektrona. Poredjem dobijenih rezultata sa balkovskim, uočene su značajne razlike koje su posledica dimenzione ograničenosti filma. Na osnovu toga može da se očekuje da će se termodinamička svojstva filma i idealnih struktura razlikovati. Sličnim postupkom, kao u slučaju beskonačnih kristala, ovde ćemo analizirati karakteristične termodinamičke veličine elektronskog podsistema, kao što su topotni kapacitet i entropija. Poznavanje ovih veličina veoma je značajno sa aspekta superprovodnosti - njihovim merenjem dobijaju se informacije o superprovodnom gepu [108,109]. Prilikom ovih analiza ograničićemo se na teorijska razmatranja u okviru modela filma sa primitivnom kubnom rešetkom.

3.3.1 Topotni kapacitet elektronskog podsistema

Zakon disperzije elektrona u filmu (3.26) uzet je u dugotalasnoj aproksimaciji i za najnižu moguću vrednost komponente kvaziimpulsa k_z (samo donji energetski gep), kako se to obično u literaturi koristi [24,72,89,110], tako da se energija elektrona dobija u sledećem obliku:

$$E(k) = Wa^2 k^2 + G ; \quad G = 4gW , \quad (3.75)$$

dok se za g uzima vrednost donjeg energetskog gepa iz izraza (3.35).

Za izračunavanje topotnog kapaciteta elektrona u tankim filmovima polazimo od izraza (kao i u slučaju idealnog kristala) za unutrašnju energiju elektronskog gasa (2.66), s tom razlikom što koristimo sledeći prelaz od sume na integral²⁰:

$$\sum_{\vec{k}} \equiv \sum_{k_x} \sum_{k_y} \sum_{k_z} \rightarrow \frac{N_f a^2}{(2\pi)^2} \frac{1}{k_z^{max} - k_z^{min}} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{k_z^{min}}^{k_z^{max}} dk_z \int_0^{k_z^{max}} k dk , \quad (3.76)$$

gde su $N_f = N_x N_y (N_z + 1)$ i $k^2 = k_x^2 + k_y^2$. Zamenom izraza (3.75) i (3.76) u izraz (2.66) on prelazi u:

$$U_f = \frac{N_f}{2\pi} \int_0^{k_z^{max}} \frac{k}{e^{(E-\mu)/\theta} + 1} dk . \quad (3.77)$$

Primenjujući isti postupak izračunavanja integrala kao u poglavljju 2.4.1 (prelaskom na integral po energiji, uvodenjem istih smena, kao i smene $\delta = G/\theta$, te zamenom gornje granice integrala sa $+\infty$) dobija se:

$$U_f = \frac{N_f}{4\pi W} \theta^2 \int_{\delta-\eta}^{\infty} \frac{\xi + \eta}{e^{\xi + \eta} + 1} d\xi . \quad (3.78)$$

Nakon parcijalne integracije integrala iz prethodnog izraza sledi:

$$U_f = \frac{N_f}{8\pi W} \theta^2 \left[\frac{-\delta^2}{e^{\delta-\eta} + 1} - \int_{-\infty}^{\infty} (\xi + \eta)^2 \frac{d}{d\xi} \frac{1}{e^{\xi + \eta} + 1} d\xi \right] , \quad (3.79)$$

gde je zbog $\eta \gg \delta$, jer je δ mala veličina ($\delta \rightarrow 0$), donja granica integrala zamenjena sa $-\infty$. Iz tih razloga se vrednost prvog izraza u uglastoj zagradi može zanemariti, a integral se svodi na

²⁰Zbog ograničenosti modelne strukture samo duž z -pravca, najzgodnije je bilo izabrati cilindrične koordinate.

tip integrala (2.68) tako da njegova negativna vrednost iznosi $\frac{\pi^2}{3} + \eta^2$, odnosno sledi da je u toj (prvoj) aproksimaciji:

$$U_f^{(1)} = \frac{N_f}{8\pi W} \mu_f^2 \left[1 + \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{\theta}{\mu_f} \right)^2 \right]. \quad (3.80)$$

Kako je i u slučaju filma ukupan broj elektrona jednak mogućem broju njihovih (energetskih) stanja, to se nalaženjem izvoda energije po μ , pri konstantnoj temperaturi, odnosno primenom (2.70), dobija da je hemijski potencijal elektrona u filmu:

$$\mu_f^{(1)} = 6\pi W, \quad (3.81)$$

pri čemu se ne uočava njegova temperaturska zavisnost.

Na osnovu izraza (3.80) i (3.81), te (2.73) dobija se da je toplotni kapacitet elektrona u filmu (u ovoj aproksimaciji) linearna funkcija temperature

$$C_f^{(1)} = \frac{k_B \pi^2}{2\mu_{f0}} \theta. \quad (3.82)$$

U okviru ove aproksimacije nismo dobili nikakve značajne informacije o zavisnosti hemijskog potencijala od temperature koja kod idealnih kristala, iako vrlo slaba, postoji. Sa druge strane, poredeći (3.84) sa (2.74), uočava se različit koeficijent pravca linearne temperaturske zavisnosti toplotnog kapaciteta filma i balka. To, dakle, ukazuje na postojanje uticaja granica sistema, na izmenjeno termodinamičko ponašanje film-struktura [24,72]. Na visokim temperaturama situacija je slična [111], tj. specifična toplota filma je proporcionalna prvom stepenu temperature. Zaključak je izgleda paradoksalan, ali zbog visokih elektronskih energija [72] i sobne temperature se mogu smatrati niskim, pa i za njih važi navedena aproksimacija.

Medjutim, ako se u izrazu (3.79) ne zanemari veličina δ već primeni linearna aproksimacija²¹ razvoja $(1 + e^{\delta-\eta})^{-1} \approx 1 - e^{\delta-\eta}$, dobija se da je:

$$U_f^{(2)} = \frac{N_f}{8\pi W} \left\{ \frac{\pi^2}{3} \theta^2 + \mu^2 - G^2 \left[1 - e^{(G-\mu)/\theta} \right] \right\}, \quad (3.83)$$

a odatle, na osnovu izraza (2.70):

$$\mu_f^{(2)} \approx 6\pi W + \frac{G^2}{2\theta} e^{(G-\mu_f^{(2)})/\theta}. \quad (3.84)$$

Tražeći limes kada $\theta \rightarrow 0$, sledi da je hemijski potencijal na temperaturi $T = 0$ K jednak: $\mu_{f0} = 6\pi W$. U eksponencijalnoj funkciji μ_f se može zameniti sa μ_{f0} zbog toga što hemijski potencijal filma slabo zavisi od temeperature, tj. $\mu_f^{(2)} \approx \mu_{f0}$ (što važi i u slučaju neograničenog kristala zbog njegove slabe zavisnosti od temperature).

Zamenom izraza za hemijski potencijal (3.84) u izraz za unutrašnju energiju (3.80) i primenom (2.73), za toplotni kapacitet elektrona u filmu se dobija:

$$C_f^{(2)} = \frac{k_B \pi^2}{2} \left[\frac{\theta}{\mu_{f0}} + \frac{3}{2\pi^2} \left(\frac{\mu_{f0}}{\theta} \right)^3 \left(\frac{G}{\mu_{f0}} \right)^2 e^{(G-\mu_{f0})/\theta} \right]. \quad (3.85)$$

Treba reći da su prilikom ovog izvodjenja zanemarivani kvadratni i viši članovi u eksponencijalnoj funkciji, kao i kubni i viši članovi veličine G (u odnosu na μ), što je opravdano iz istih razloga kao i u prethodnom slučaju (videti obrazloženje).

²¹Linearna aproksimacija u ovima analizama je opravdana zbog linearne dugotalasne aproksimacije sinusa iz zakona disperzije, tako da nema razloga ići na više članove jer je $a^2 k^2 / 2m^* \sim \theta$.

Radi poredjenja ovih rezultata sa odgovarajućim za idealne (neograničene) kristale, uvodimo sledeće oznake:

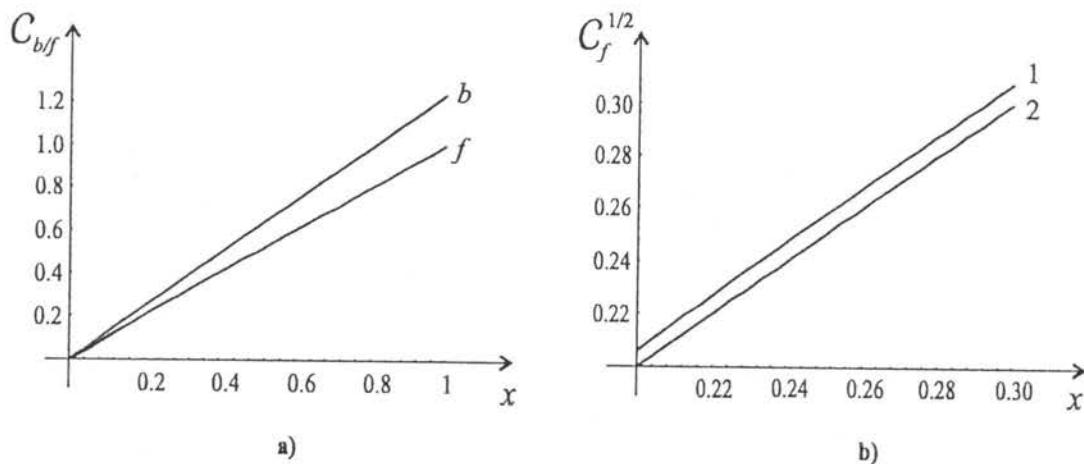
$$C_0 = \frac{k_B \pi^2}{2} ; \quad \frac{\theta}{\mu_{f_0}} = x , \quad (3.86)$$

što nam omogućava da potrebne veličine pretvorimo u bezdimenzijsne, kako bismo grafički mogli da prikažemo njihovu zavisnost od temperature. Zamenom relacija (3.86), u izraz za topotni kapacitet elektrona u neograničenim strukturama (2.74) i film strukturama (3.82) - prva aproksimacija, odnosno (3.85) - druga aproksimacija, oni, respektivno, postaju:

$$C_b \equiv \frac{C_b}{C_0} = \sqrt[3]{\frac{6}{\pi}} x \approx 1.24 x ; \quad C_f^{(1)} \equiv \frac{C_f^{(1)}}{C_0} = x , \quad (3.87)$$

$$C_f^{(2)} \equiv \frac{C_f^{(2)}}{C_0} = x + \frac{2}{3\pi^4} \frac{1}{x^3} g^2 \exp \left[-\frac{1}{x} \left(1 - \frac{2}{3\pi} g \right) \right] . \quad (3.88)$$

Ono što se odmah iz izraza (3.87) uočava je linearna zavisnost topotnog kapaciteta elektrona u oba analizirana sistema (film i balk), s tom razlikom što je u filmu njegov koeficijent nešto niži. Međutim, iz izraza (3.88) bi se moglo zaključiti da ta zavisnost odstupa od linearne. Detaljnije analize sprovedene su numeričkim putem i grafičkim prikazivanjem. Naime, za razne vrednosti perturbacionih parametara računata je veličina donjeg gepa g i zamenjivana u izraz (3.88). Ako se uzme da veličina x uzima vrednosti u intervalu $x \in \{0, 1\}$, dobija se da je topotni kapacitet u filmu isti za obe aproksimacije, bez obzira na vrednosti perturbacionih parametara. Ta zavisnost je prikazana na slici 3.22a, gde se kriva b odnosi na topotni kapacitet u balku, a kriva f na topotni kapacitet u filmu.



Slika 3.22: Zavisnost topotnog kapaciteta elektrona od temperature

Međutim, iscrpnije analize pokazuju da u oblasti niskih temperatura, interval $0.1 - 0.4)x$, dolazi do izvesnog odstupanja u zavisnosti topotnog kapaciteta filma od temperature, za posmatrane aproksimacije (iako je u oba slučaja zavisnost linearna). Ovo odstupanje je maksimalno u oblasti $(0.2 - 0.3)x$, što je i grafički prikazano na slici 3.22b (1- prva, 2 - druga aproksimacija), za petoslojni film i vrednosti perturbacionih parametara $\epsilon_{1/2} = w_{1/2} = -0.5$. Pored toga, pokazano je da se povećanjem veličine donjeg energetskog gepa (što se postiže pogodnim izborom parametara, kao i smanjenjem debljine filma) vrednost topotnog kapaciteta smanjuje (udaljava od balkovske vrednosti).

Sa prikazanih slika je evidentno da, praktično u celom relevantnom temperaturskom intervalu, toplotni kapacitet linearne zavisi od temperature i u film-strukturama, ali je, za razliku od masivnih uzoraka, ovde ta zavisnost „manje strma“. Drugim rečima, toplotni kapacitet filma ima niže vrednosti na istim temperaturama nego neograničene strukture. Fizički bi to značilo da je za zagrevanje filmova od-do nekih temperatura potrebno uložiti veću energiju nego od-do istih temperatura za masivne uzorke²².

3.3.2 Elektronski udeo u entropiji

Isti postupak kao u prethodnom slučaju primenićemo sada za izračunavanje entropije pod-sistema elementarnih nanelektrisanja u film-strukturi, polazeći od izraza za slobodnu energiju (2.75). Nakon izračunavanja slobodne energije uz iste rezone kao prilikom izračunavanja unutrašnje energije, na osnovu (2.78) i (3.75, 3.76, 3.81 i 2.78) izraz za entropiju u tom „najgrubljem“ slučaju, dobija se kao:

$$S_f^{(1)} = \frac{k_B \pi^2}{2} \frac{3}{2} \frac{\theta}{\mu_{f0}} . \quad (3.89)$$

Iz istih razloga (nepreciznost aproksimacije) kao u prethodnom izračunavanju unutrašnje energije i toplotnog kapaciteta, primenjujemo tačniji prilaz. Tako, analognim postupkom izračunavanja, izraz za slobodnu energiju (2.75) dobija oblik:

$$F_f^{(2)} = -\frac{N_f}{4\pi W} \theta^2 \left[(\eta - \delta) \ln(1 + e^{\eta-\delta}) - \frac{(\delta - \eta)^2}{2(e^{\eta-\delta} + 1)} + \frac{\pi^2}{6} \right] . \quad (3.90)$$

Na osnovu već obrazloženih i napred učinjenih aproksimacija, uzimajući $\ln(1 + e^{\eta-\delta}) \approx \eta - \delta$, te zamenom izraza (3.84) i primenom (2.78), dobija se izraz za entropiju elektrona u filmu kao:

$$\begin{aligned} S_f^{(2)} &= \frac{k_B \pi^2}{2} \left\{ \frac{3}{2} \frac{\theta}{\mu_{f0}} + \frac{9}{4\pi^2} \left(\frac{\mu_{f0}}{\theta} \right)^2 \left[2 \left(\frac{G}{\mu_{f0}} \right)^2 - 3 \frac{G}{\mu_{f0}} + 1 \right] e^{(G-\mu_{f0})/\theta} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{9}{4\pi^2} \left(\frac{\mu_{f0}}{\theta} \right)^3 \left(\frac{G}{\mu_{f0}} \right)^2 e^{(G-\mu_{f0})/\theta} \right\} . \end{aligned} \quad (3.91)$$

Dobijene rezultate za entropiju elektrona u film-strukturama uporedićemo sa odgovarajućim u neograničenim kristalima, pa stoga uvodimo pomoćne oznake:

$$S_0 = \frac{k_B \pi^2}{2} ; \quad \frac{\theta}{\mu_{f0}} = x . \quad (3.92)$$

Njihovom zamenom u izraze (2.74), odnosno (3.89) i (3.91) dobija se:

$$S_b \equiv \frac{S_b}{S_0} = \sqrt[3]{\frac{6}{\pi}} x \approx 1.24 x ; \quad S_f^{(1)} \equiv \frac{S_f^{(1)}}{S_0} = \frac{3}{2} x , \quad (3.93)$$

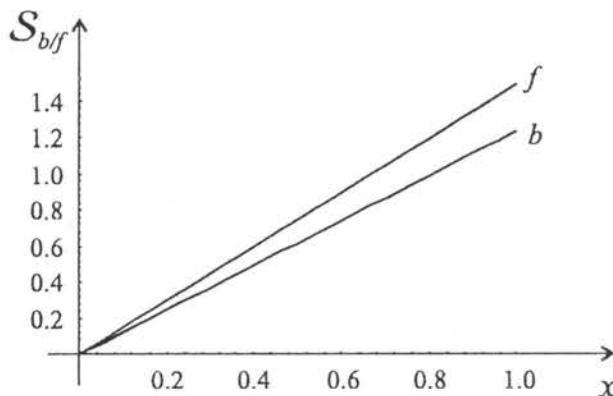
odnosno,

$$\begin{aligned} S_f^{(2)} \equiv \frac{S_f^{(2)}}{S_0} &= \frac{3}{2} x + \frac{9}{4\pi^2} \frac{1}{x^2} \left[1 - \frac{2}{\pi} g + \frac{8}{9\pi^2} g^2 \right] \exp \left[-\frac{1}{x} \left(1 - \frac{2}{3\pi} g \right) \right] + \\ &\quad + \frac{1}{\pi^4} \frac{1}{x^3} g^2 \exp \left[-\frac{1}{x} \left(1 - \frac{2}{3\pi} g \right) \right] . \end{aligned} \quad (3.94)$$

²²Deo energije se „troši na aktivaciju elektronskog podsistema, pa tek tako nastali podsistem može da učestvuje u transportu toplice.

Ove zavisnosti predstavljene su na slici 3.23, odakle se vidi da je entropija u filmu (kriva f) veća u odnosu na beskonačne strukture (kriva b), naravno, poredeći ih na istoj temperaturi. Pri tome, kao i uslučaju toplotnog kapaciteta odstupanje prve i druge aproksimacije javlja se u oblasti niskih temperatura. Takodje, za što veće vrednosti energetskog gепа (tanji film ili pogodni parametri) entropija više odstupa od balkovske vrednosti - povećava se.

S obzirom na predominantnu linearnu temperatursku zavisnost, jasno je da je koeficijent pravca za entropiju film-strukture veći nego balkovski. Kako je entropija mera neuredjenosti sistema, dolazimo do zaključka da su filmovi neuredjeniji termodinamički sistemi i da je podsistem nosilaca nanelektrisanja u stanju koje je uvek bliže ravnotežnom stanju nego istih u neograničenim strukturama. Takvo ponašanje film-struktura javlja se kao posledica dimenzione ograničenosti.



Slika 3.23: Zavisnost entropije elektrona od temperature

Iz ove analize se vidi da termodinamičke osobine elektrona u tankim filmovima zavise kako od dimenzija filma tako i od graničnih perturbacionih parametara. Naročito je izražen taj uticaj na niskim temperaturama. Takodje je pokazano da i specifična toplota fonona u kristalnim filmovima [89,112] jako zavisi od ovih parametara i na niskim temperaturama je niža od balkovske. To je veoma važno saznanje jer ukazuje na to da se prilikom proizvodnje i primene filmova promenom graničnih parametara može uticati na njihove makroskopske osobine. Na primer, veća specifična toplota u dielektričnim filmovima poboljšava njihova dielektrična svojstva [67,68].

Pored toga, na osnovu sprovedene termodinamičke analize može se zaključiti da film-strukture predstavljaju „bolje“ superprovodne sisteme jer su „bliži“ ravnotežnom stanju i mogu da pretrpe veći skok toplotnog kapaciteta. Ovo potvrđuju eksperimentalne činjenice [113], a ono što je još bitnije, na osnovu ovoga se može zaključiti (i u okviru BCS teorije) da se odgometka o visokotemperaturskoj superprovodnosti može potražiti u specifičnostima ponašanja sistema unutar jako izraženih granica (slojevita struktura i sl.).

4 Elektroni u superrešetkama

Heterostrukture i superrešetke, u današnjem smislu reči, prvi put su analizirane početkom sedamdesetih godina [114]. Ovde je po prvi put predložena struktura koja se sastoji od vrlo mnogo naizmenično rasporedjenih tankih slojeva dva različita poluprovodnika, pri čemu poluprovodnik sa nižim dnom provodne zone predstavlja jamu za elektrone, dok je drugi barijera. Ako je broj slojeva veliki (nekoliko desetina, pa i stotina) ovakva struktura se može, radi lakšeg teorijskog tretmana, posmatrati kao beskonačna²³ sa osnovnim periodom d koji je jednak zbiru debljina jame d_1 i barijere d_2 i dvadesetak puta prevazilazi konstantu kristalne rešetke.

Ovakve strukture nazivaju se kompozicione jer su ostvarene modulacijom kompozicije duž jednog pravca (z -ose). Danas se zahvaljujući razvoju moderne tehnologije kristalnog rasta [7-9] mogu napraviti visokokvalitetne superrešetke sa podešenim zonskim profilom [115] i debljinama konstituenata (d_1 i d_2) od dva ili tri pa do sto atomskih slojeva [1,2]. Pri tome, konstituenti mogu biti različite vrste materijala (poluprovodnici, dielektrici, metali, ili njihove kombinacije) sa velikom mogućnošću variranja fizičkih osobina na dimenzijama reda veličine nanometra.

Drugi tip superrešetki - dopirane superrešetke, prvi put su analizirane 1972. [116]. Kod njih se jame i barijere dobijaju naizmeničnim dopiranjem balka akceptorskim ili donorskim primersama. U odnosu na kompozicione, dopirane superrešetke poseduju prednost, jer ne zahtevaju usaglašenost rešetkinih konstanti. Pored toga one poseduju još jednu inteteresantnu osobinu: indirektni energetski procepi u realnom prostoru (elektroni i šupljine su prostorno razdvojeni). Iz tehnoloških razloga kod ovih superrešetki ne mogu se ostvariti periodi manji od nekoliko desetina nanometara, dok je to kod kompozicionih moguće. Da bi se dobole dovoljno duboke jame potrebno je izvršiti dopiranje vrlo visokom koncentracijom primesa. Kod kompozicionih superrešetki jame se ostvaruju diskontinuitetima provodne (valentne zone), a potrebno dopiranje je znatno manje. Zbog toga se kompozicione superrešetke češće primenjuju od dopiranih.

Kod superrešetke, pored trodimenzijske zavisnosti potencijalne energije koja se intezivno menja u okviru konstante rešetke, postoji dodatna periodična jednodimenzijska zavisnost potencijalne energije koja se vrlo sporo menja na domenu konstante rešetke. Ova dodatna sporo promenljiva zavisnost je uzrok da se dno (vrh) provodne (valentne) zone cepe na niz dozvoljenih podzona [1-3]. Ovako drastično odstupanje strukture provodne (valentne) zone od balkovske uzrok je da se i makroskopski parametri superrešetki bitno razlikuju od balkovskih. Sporo-promenljiva zavisnost potencijalne energije kod superrešetke se može relativno jednostavno menjati, na primer promenom debljine polaznih materijala, a samim tim i makroskopske osobine. Na ovaj način superrešetke predstavljaju nove materijale, čije se osobine, bar u principu, mogu podešavati u željenom opsegu.

Pored toga, pokazano je da su superrešetke pogodne strukture za izučavanje velikog broja transportnih i fizičkih fenomena, kao što su: negativna diferencijalna provodnost [117], Blohove oscilacije [118,119], pojava Vanije-Šarkovih stepenica, dinamička lokalizacija [120] i mnogi drugi. Sve to je izazvalo interes za intezivnim proučavanjem ovih struktura.

Sa stanovišta primene superrešetki najvažnije je poznavati njihovu elektronsku strukturu. Shodno tome, napor i istraživača uglavnom su usmereni na određivanje elektronskih osobina ovih materijala, korišćenjem raznih metoda izračunavanja: metod envelopnih funkcija, metod

²³Efekti na kvantnom nivou modifikuju kvazidimenzijsku strukturu kristalnog filma u trodimenzijsku neograničenu strukturu superrešetke.

pseudopotencijala, metod efektivne mase, metod Grinovih funkcija ili razne kombinacije ovih metoda [1,25,121-130].

Ovde će metodom Grinovih funkcija najpre biti nadjen zakon disperzije [87,88,131,132] i spektralne težine elektrona [88,133] za uopšteni model superrešetke. Kombinacijom dobijenih rezultata, kao i poznatih rezultata dobijenih u aproksimaciji efektivne mase, biće analizirane elektronske osobine $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ superrešetke [134]. Za model proste superrešetke biće izračunate termodinamičke osobine.

Superrešetke se danas primenjuju za izradu:

- poluprovodničkih laserskih dioda i lasera,
- detektora infracrvenog zračenja,
- tranzistora sa efektom polja.

Potencijalne primene ovih struktura koje se mogu uskoro očekivati su:

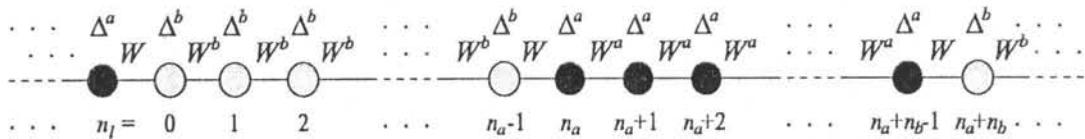
- infracrveni detektori na bazi unutarzonskih prelaza,
- izvori mikrotalasnog zračenja,
- diode sa rezonantnim tunelovanjem,
- unipolarni poluprovodnički laseri (sa unutarzonskim prelazima),
- elektrooptički modulatori [1,2].

4.1 Zakon disperzije elektrona u superrešetkama

Jedna od grupa metoda analiziranja elektronske strukture superrešetki polazi od činjenice da su pojedini slojevi u njima, mada slični balku, ipak suviše tanki da bi osobine balka bile relevantne za njihovo opisivanje. Umesto toga, ove metode polaze od osobina atoma koji čine tu strukturu. Unapred poznatim smatraju se karakteristike atoma (elektrona) i njihove medjusobne interakcije (ili potencijali koji to opisuju). Praktično, to znači da se konstruiše elementarna ćelija, kao najmanja struktura čije translacije reprodukuju celu superrešetku, analogno elementarnoj ćeliji balka, i izračunava elektronska struktura te „superćelije”. Stoga se ova grupa metoda naziva metodom superćelije [1]. Na taj način ovde će biti analizirana elektronska struktura kompozicionih superrešetki.

Model superrešetke

Ovde je posmatrana kristalna superrešetka formirana od naizmenično poredjanih tankih filmova sastavljenih od n_a slojeva (debljine d_1) konstituenta tipa A i n_b slojeva (debljine d_2) konsistenta tipa B (često korišćen model periodične superrešetke [25,121-128]) duž z-pravca, dok je u x i y pravacima neograničena [131-135] (na slici 4.1 prikazan je raspored atoma superrešetke duž z-pravca). Da bi bio moguć spoj slojeva sačinjenih od različitih atoma moraju konstante rešetke duž x i y pravaca, respektivno, biti jednake, tj. $a_x^a = a_x^b = a_x$ i $a_y^a = a_y^b = a_y$, dok duž z pravca mogu biti različite ($a_z^a = a^a \neq a_z^b = a^b$ i $a_z^{a-b} = a$).



Slika 4.1: Raspored atoma u superrešetki

Analizu elektronskog podsistema superrešetke započinjemo standardnim hamiltonijanom modelne strukture koji u aproksimaciji najbližih suseda ima oblik [131-133]:

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{m_{x/y/z}=-N_{x/y/z}/2}^{N_{x/y/z}/2} \left\{ \sum_{m_l=0}^{n_a-1} \Delta^a a_{m_x m_y m_z m_l}^+ a_{m_x m_y m_z m_l} + \right. \\
 & + \sum_{m_l=n_a}^{n_a+n_b-1} \Delta^b a_{m_x m_y m_z m_l}^+ a_{m_x m_y m_z m_l} - \\
 & - \sum_{m_l=1}^{n_a-2} W^a a_{m_x m_y m_z m_l}^+ (a_{m_x m_y m_z m_l-1} + a_{m_x m_y m_z m_l+1}) - \\
 & - \sum_{m_l=n_a+1}^{n_a+n_b-2} W^b a_{m_x m_y m_z m_l}^+ (a_{m_x m_y m_z m_l-1} + a_{m_x m_y m_z m_l+1}) - \\
 & - a_{m_x m_y m_z, 0}^+ (W a_{m_x m_y m_z-1, n_a+n_b-1} + W^a a_{m_x m_y m_z, 1}) - \\
 & - a_{m_x m_y m_z, n_a-1}^+ (W^a a_{m_x m_y m_z, n_a-2} + W a_{m_x m_y m_z, n_a}) - \\
 & - a_{m_x m_y m_z, n_a}^+ (W a_{m_x m_y m_z, n_a-1} + W^b a_{m_x m_y m_z, n_a+1}) - \\
 & - a_{m_x m_y m_z, n_a+n_b-1}^+ (W^b a_{m_x m_y m_z, n_a+n_b-2} + W a_{m_x m_y m_z+1, 0}) - \\
 & - \sum_{m_l} [W_x^{a/b} a_{m_x m_y m_z m_l}^+ (a_{m_x-1, m_y m_z m_l} + a_{m_x+1, m_y m_z m_l}) + \\
 & \left. + W_y^{a/b} a_{m_x m_y m_z m_l}^+ (a_{m_x m_y-1, m_z m_l} + a_{m_x m_y+1, m_z m_l})] \right\} ,
 \end{aligned} \tag{4.1}$$

gde su $\Delta^{a/b}$ energije elektrona lokalizovanih na kristalnim čvorovima, dok su $W_x^{a/b}$, $W_y^{a/b}$ i $W^{a/b}$ energije elektronskog transfera izmedju istih atoma duž x , y i z pravaca respektivno. W je energija elektronskog transfera izmedju različitih atoma duž z pravca, $m_{x/y}$ brojač atomskog čvora po X , tj. y pravcu, m_z brojač položaja početka osnovnog lanca superrešetke (duž z pravca), a $m_l \in [0, n_a + n_b - 1]$ je brojač položaja čvora u osnovnom lancu. Zbog pogodnosti, hamiltonijan iz gornje relacije pisaćemo u obliku zbiru:

$$H = H_1 + H_2 - \sum_{\nu=3}^{10} H_\nu , \tag{4.2}$$

pri čemu su:

$$\begin{aligned}
 H_1 &= \sum_{m_{x/y/z}=-N_{x/y/z}/2}^{N_{x/y/z}/2} \sum_{m_l=0}^{n_a-1} \Delta^a a_{m_x m_y m_z m_l}^+ a_{m_x m_y m_z m_l} , \\
 H_2 &= \sum_{m_{x/y/z}=-N_{x/y/z}/2}^{N_{x/y/z}/2} \sum_{m_l=n_a}^{n_a+n_b-1} \Delta^b a_{m_x m_y m_z m_l}^+ a_{m_x m_y m_z m_l} , \\
 H_3 &= \sum_{m_{x/y/z}=-N_{x/y/z}/2}^{N_{x/y/z}/2} \sum_{m_l=1}^{n_a-2} W^a a_{m_x m_y m_z m_l}^+ (a_{m_x m_y m_z m_l-1} + a_{m_x m_y m_z m_l+1}) , \\
 H_4 &= \sum_{m_{x/y/z}=-N_{x/y/z}/2}^{N_{x/y/z}/2} \sum_{m_l=n_a+1}^{n_a+n_b-2} W^b a_{m_x m_y m_z m_l}^+ (a_{m_x m_y m_z m_l-1} + a_{m_x m_y m_z m_l+1}) ,
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_5 &= \sum_{m_{x/y/z}=-N_{x/y/z}/2}^{N_{x/y/z}/2} a_{m_x m_y m_z, 0}^+ (W a_{m_x m_y m_z - 1, n_a + n_b - 1} + W^a a_{m_x m_y m_z, 1}) , \\
H_6 &= \sum_{m_{x/y/z}=-N_{x/y/z}/2}^{N_{x/y/z}/2} a_{m_x m_y m_z, n_a - 1}^+ (W^a a_{m_x m_y m_z, n_a - 2} + W a_{m_x m_y m_z, n_a}) , \\
H_7 &= \sum_{m_{x/y/z}=-N_{x/y/z}/2}^{N_{x/y/z}/2} a_{m_x m_y m_z, n_a}^+ (W a_{m_x m_y m_z, n_a - 1} + W^b a_{m_x m_y m_z, n_a + 1}) , \\
H_8 &= \sum_{m_{x/y/z}=-N_{x/y/z}/2}^{N_{x/y/z}/2} a_{m_x m_y m_z, n_a + n_b - 1}^+ (W^b a_{m_x m_y m_z, n_a + n_b - 2} + W a_{m_x m_y m_z + 1, 0}) , \\
H_9 &= \sum_{m_{x/y/z}=-N_{x/y/z}/2}^{N_{x/y/z}/2} W_x^{a/b} a_{m_x m_y m_z m_l}^+ (a_{m_x - 1, m_y m_z m_l} + a_{m_x + 1, m_y m_z m_l}) , \\
H_{10} &= \sum_{m_{x/y/z}=-N_{x/y/z}/2}^{N_{x/y/z}/2} W_y^{a/b} a_{m_x m_y m_z m_l}^+ (a_{m_x m_y - 1, m_z m_l} + a_{m_x m_y + 1, m_z m_l}) .
\end{aligned}$$

Za proizvoljnu funkciju položaja važe uslovi cikličnosti po x i y indeksima pomoću kojih se dobijaju dozvoljene vrednosti x i y komponenti talasnog vektora:

$$f_{m_x m_y m_z m_l + N_{x/y}} = f_{m_x m_y m_z m_l} , \quad (4.3)$$

na osnovu čega sledi:

$$e^{i N_{x/y} k_{x/y} a_{x/y}} = e^{2\pi \nu_{x/y} i} . \quad (4.4)$$

Na analogan način se može napisati i ciklični uslov po z koordinati:

$$f_{m_x m_y m_z m_l + (n_a + n_b) N_z} = f_{m_x m_y m_z m_l} , \quad (4.5)$$

odakle se dobija:

$$e^{i (n_a + n_b) N_z k_z \tilde{a}} = e^{2\pi \nu_z i} . \quad (4.6)$$

Prebrojavanje dozvoljenih vrednosti z komponente talasnog vektora, tj. k_z vrši se brojačem $\nu_z \in 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm N_z / 2$ čime se definišu granice I Briluenove zone duž z pravca²⁴ [122]:

$$k_z \in \left[-\frac{\pi}{(n_a + n_b) \tilde{a}}, +\frac{\pi}{(n_a + n_b) \tilde{a}} \right] , \quad (4.7)$$

gde je uvedena oznaka \tilde{a} za srednju vrednost konstante rešetke duž z pravca:

$$\tilde{a} = \frac{(n_a - 1)a^a + (n_b - 1)a^b + 2a}{n_a + n_b} . \quad (4.8)$$

²⁴Najvažnija posledica postojanja dugog prostornog perioda ($d = d_1 + d_2 = \tilde{a} n_a + \tilde{a} n_b$) je da se nova granica Briluenove zone pojavljuje sa komponentom talasnog vektora π/d normalnoj slojevima. Ovaj vektor može biti mnogo manji nego što je talasni vektor granice I Briluenove zone π/a koji odgovara rešetki konstante a [2,122].

Jednačine kretanja

Zakon disperzije elektrona, kao i kod kristalnih filmova, može se naći standardnim metodom Grinovih funkcija [34,35,87, 131-133]. Računa se jednočestična antikomutatorska Grinova funkcija pomoću predhodno definisanog Hamiltoniana sistema:

$$G_{n_x n_y n_z n_l; m_x m_y m_z m_l} = \Theta(t) \langle \{a_{n_x n_y n_z n_l}, a_{m_x m_y m_z m_l}^+\} \rangle . \quad (4.9)$$

U daljem tekstu uzima se da je $\vec{n} \equiv (n_x n_y n_z n_l)$ i $\vec{m} \equiv (m_x m_y m_z m_l)$. Jednačina kretanja za Grinovu funkciju je:

$$i\hbar \frac{d}{dt} G_{\vec{n}; \vec{m}}(t) = i\hbar \delta(t) \delta_{\vec{n}; \vec{m}} + \Theta(t) \langle \{[a_{\vec{n}}(t), H], a_{\vec{m}}^+(0)\} \rangle . \quad (4.10)$$

Drugi deo izraza na desnoj strani jednačine kretanja (4.10) označićemo kao:

$$\Theta(t) \langle \{[a_{\vec{n}}, H], a_{\vec{m}}^+\} \rangle = F , \quad (4.11)$$

a komutator:

$$\hat{C} \equiv \hat{C}_{\vec{n}} \equiv [a_{\vec{n}}, H] = \hat{C}_1 + C_2 - \sum_{\nu=3}^{10} \hat{C}_\nu , \quad (4.12)$$

na osnovu čega dobijamo:

$$F \equiv F_{\vec{n}; \vec{m}} \equiv \Theta(t) \langle \{\hat{C}, a_{\vec{m}}^+\} \rangle = F_1 + F_2 - \sum_{\nu=3}^{10} F_\nu . \quad (4.13)$$

Za izračunavanje komutatora $[a_{\vec{n}}, H]$ koristićemo standardne fermionske komutatorske relacije (2.36). Dalje se vrši računanje komutatora \hat{C}_ν :

$$\begin{aligned} \hat{C}_1 &= [a_{\vec{n}}, H_1] = \Delta^a \sum_{\vec{m}} [a_{\vec{m}}, a_{\vec{m}}^+ a_{\vec{m}}] = \\ &= \Delta \sum_{\vec{m}} [a_{\vec{m}}^+ (a_{\vec{n}}, a_{\vec{m}} - a_{\vec{m}} a_{\vec{n}}) + (a_{\vec{n}} a_{\vec{m}}^+ - a_{\vec{m}}^+ a_{\vec{n}}) a_{\vec{m}}] . \end{aligned} \quad (4.14)$$

Iz relacije (2.36) sledi: $a_{n_x n_y n_z n_l} a_{m_x m_y m_z m_l} = -a_{m_x m_y m_z m_l} a_{n_x n_y n_z n_l}$, $a_{m_x m_y m_z m_l}^+ a_{n_x n_y n_z n_l} = \delta_{n_x m_x} \delta_{n_y m_y} \delta_{n_z m_z} \delta_{n_l n_l} - a_{n_x n_y n_z n_l} a_{m_x m_y m_z m_l}^+$, pa je:

$$\begin{aligned} \hat{C}_1 &= \Delta^a \sum_{m_x m_y m_z m_l} \left[a_{m_x m_y m_z m_l}^+ 2 a_{n_x n_y n_z n_l} a_{m_x m_y m_z m_l} + \right. \\ &\quad \left. + (2 a_{n_x n_y n_z n_l} a_{m_x m_y m_z m_l}^+ - \delta_{n_x m_x} \delta_{n_y m_y} \delta_{n_z m_z} \delta_{n_l m_l}) a_{m_x m_y m_z m_l} \right] = \\ &= \Delta^a \sum_{m_x m_y m_z m_l} \left[2 (\delta_{n_x m_x} \delta_{n_y m_y} \delta_{n_z m_z} \delta_{n_l m_l} - a_{n_x n_y n_z n_l} a_{m_x m_y m_z m_l}^+) + \right. \\ &\quad \left. + (2 a_{n_x n_y n_z n_l} a_{m_x m_y m_z m_l}^+ - \delta_{n_x m_x} \delta_{n_y m_y} \delta_{n_z m_z} \delta_{n_l m_l}) \right] a_{m_x m_y m_z m_l} = \\ &= \Delta^a \sum_{m_x m_y m_z m_l} a_{m_x m_y m_z m_l} \delta_{n_x m_x} \delta_{n_y m_y} \delta_{n_z m_z} \delta_{n_l m_l} . \end{aligned}$$

Poznato je da $\delta_{n_x n_y n_z n_l; m_x m_y m_z m_l}$ „skida“ sumu po m_x, m_y, m_z, m_l i svako $m_j \rightarrow n_j$, ($j = x, y, z, l$), te se konačno dobija: $\hat{C}_1 = \Delta^a a_{n_x n_y n_z n_l}$. Analognim računom za ostale vrednosti

komutatora \hat{C}_ν se dobija:

$$\begin{aligned}\hat{C}_2 &= \Delta^b a_{n_x n_y n_z n_l}, & \hat{C}_3 &= W^a (a_{n_x n_y n_z n_l - 1} + a_{n_x n_y n_z n_l + 1}), \\ \hat{C}_4 &= W^b (a_{n_x n_y n_z n_l - 1} + a_{n_x n_y n_z n_l + 1}), \\ \hat{C}_5 &= W a_{n_x n_y n_z - 1, n_a + n_b + 1} \delta_{n_l, 0} + W^a a_{n_x n_y n_z, 1} \delta_{n_l, 0}, \\ \hat{C}_6 &= W^a a_{n_x n_y n_z, n_a - 2} \delta_{n_l, n_a - 1} + W a_{n_x n_y n_z n_a} \delta_{n_l, n_a - 1}, \\ \hat{C}_7 &= W a_{n_x n_y n_z, n_a - 1} \delta_{n_l, n_a} + W^b a_{n_x n_y n_z, n_a + 1} \delta_{n_l, n_a}, \\ \hat{C}_8 &= W^b a_{n_x n_y n_z, n_a + n_b - 2} \delta_{n_l, n_a + n_b - 1} + W a_{n_x n_y n_z + 1, 0} \delta_{n_l, n_a + n_b - 1}, \\ \hat{C}_9 &= W_x^{a/b} (a_{n_x - 1, n_y n_z n_l} + a_{n_x + 1, n_y n_z n_l}) \delta_{n_l, m_l}, \\ \hat{C}_{10} &= W_y^{a/b} (a_{n_x n_y - 1, n_z n_l} + a_{n_x n_y + 1, n_z n_l}) \delta_{n_l, m_l}.\end{aligned}$$

Pomoću izračunatih komutatora mogu se napisati izrazi za svako F_ν iz jednačine (4.11). Npr.

$$F_1 = \Theta(t) \langle \left\{ \hat{C}_1, a_{m_x m_y m_z m_l}^+ \right\} \rangle = \Delta^a \Theta(t) \langle \left\{ a_{n_x n_y n_z n_l}, a_{m_x m_y m_z m_l}^+ \right\} \rangle = \Delta^a G_{n_x n_y n_z n_l; \vec{m}}(t),$$

a analogno se dobijaju i ostale vrednosti:

$$\begin{aligned}F_2 &= \Delta^b G_{n_x n_y n_z n_l; \vec{m}}(t), \\ F_3 &= W^a G_{n_x n_y n_z n_l - 1; \vec{m}}(t) + W^a G_{n_x n_y n_z n_l + 1; \vec{m}}(t), \\ F_4 &= W^b G_{n_x n_y n_z n_l - 1; \vec{m}}(t) + W^b G_{n_x n_y n_z n_l + 1; \vec{m}}(t), \\ F_5 &= W \delta_{n_l, 0} G_{n_x n_y n_z - 1, n_a + n_b - 1; \vec{m}}(t) + W^a \delta_{n_l, 0} G_{n_x n_y n_z, 1; \vec{m}}(t), \\ F_6 &= W^a \delta_{n_l, n_a - 1} G_{n_x n_y n_z, n_a - 2; \vec{m}}(t) + W \delta_{n_l, n_a - 1} G_{n_x n_y n_z, n_a; \vec{m}}(t), \\ F_7 &= W \delta_{n_l, n_a} G_{n_x n_y n_z, n_a - 1; \vec{m}}(t) + W^b \delta_{n_l, n_a} G_{n_x n_y n_z, n_a + 1; \vec{m}}(t), \\ F_8 &= W^b \delta_{n_l, n_a + n_b - 1} G_{n_x n_y n_z, n_a + n_b - 2; \vec{m}}(t) + W \delta_{n_l, n_a + n_b - 1} G_{n_x n_y n_z + 1, 0; \vec{m}}(t), \\ F_9 &= W_x^{a/b} \delta_{n_l, m_l} G_{n_x - 1, n_y n_z, n_l; \vec{m}}(t) + W_x^{a/b} \delta_{n_l, m_l} G_{n_x + 1, n_y n_z, n_l; \vec{m}}(t), \\ F_{10} &= W_y^{a/b} \delta_{n_l, m_l} G_{n_x, n_y - 1, n_z, n_l; \vec{m}}(t) + W_y^{a/b} \delta_{n_l, m_l} G_{n_x, n_y + 1, n_z, n_l; \vec{m}}(t).\end{aligned}$$

Zamenom dobijenih vrednosti u jednačinu kretanja za Grinovu funkciju, dobija se:

$$\begin{aligned}i\hbar \frac{d}{dt} G_{\vec{n}, \vec{m}}(t) &= i\hbar \delta_{\vec{n}, \vec{m}} \delta(t) + \Delta_{\vec{n}} G_{\vec{n}, \vec{m}}(t) - W_x^{\vec{n}} [G_{n_x + 1, n_y n_z; \vec{m}}(t) + G_{n_x - 1, n_y n_z; \vec{m}}(t)] - \\ &- W_y^{\vec{n}} [G_{n_x n_y + 1, n_z; \vec{m}}(t) + G_{n_x n_y - 1, n_z; \vec{m}}(t)] - \\ &- W_{\vec{n}; n_x n_y n_z n_l - 1} G_{n_x n_y n_z n_l - 1; \vec{m}} - W_{\vec{n}; n_x n_y n_z n_l + 1} G_{n_x n_y n_z n_l + 1; \vec{m}},\end{aligned} \quad (4.15)$$

gde su uvedene označke:

$$\begin{aligned}\Delta_{\vec{n}} &= \begin{cases} \Delta^a & 0 \leq n_l \leq n_a - 1 \\ \Delta^b & n_a \leq n_l \leq n_a + n_b - 1 \end{cases} \\ W_{x/y}^{\vec{n}} &= \begin{cases} W_x^{a/y} & 0 \leq n_l \leq n_a - 1 \\ W_y^{b/x} & n_a \leq n_l \leq n_a + n_b - 1 \end{cases} \\ W_{\vec{n}; n_x n_y n_z n_l - 1} &= \begin{cases} W^a & 1 \leq n_l \leq n_a - 1 \\ W^b & n_a + 1 \leq n_l \leq n_a + n_b - 1 \\ W & n_l = 0, n_l = n_a \end{cases} \\ W_{\vec{n}; n_x n_y n_z n_l + 1} &= \begin{cases} W^a & 0 \leq n_l \leq n_a - 2 \\ W^b & n_a \leq n_l \leq n_a + n_b - 2 \\ W & n_l = n_a - 1, n_l = n_a + n_b - 1 \end{cases}\end{aligned} \quad (4.16)$$

Nakon izvršene vremenske Furije transformacije:

$$G_{\vec{n},\vec{m}}(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega t} G_{\vec{n},\vec{m}}(\omega), \quad \delta(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega t}, \quad (4.17)$$

dobija se jednačina kretanja u sledećem obliku:

$$\begin{aligned} \hbar\omega G_{\vec{n},\vec{m}} &= \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{\vec{n},\vec{m}} + \Delta_{\vec{n}} G_{\vec{n},\vec{m}} - \\ &- W_x^{\vec{n}} (G_{n_x-1,n_y,n_z,n_l;\vec{m}} + G_{n_x+1,n_y,n_z,n_l;\vec{m}}) - W_y^{\vec{n}} (G_{n_x n_y - 1, n_z n_l; \vec{m}} + G_{n_x n_y + 1, n_z n_l; \vec{m}}) - \\ &- W_{\vec{n};n_x n_y n_z n_l-1} G_{n_x n_y n_z n_l-1;\vec{m}} W_{\vec{n};n_x n_y n_z n_l+1} G_{n_x n_y n_z n_l+1;\vec{m}}. \end{aligned} \quad (4.18)$$

Zbog narušenja translacione invarijantnosti posmatranog sistema uvodi se delimična prostorna Furije transformacija po indeksima x , y i z (jer je po indeksu l translaciona simetrija narušena) u obliku:

$$f_{\vec{n};\vec{m}} = \frac{1}{N_x N_y N_z} \sum_{k_x k_y k_z} f_{n_l; m_l} e^{i[a_x k_x (n_x - m_x) + a_y k_y (n_y - m_y) + \tilde{a}(n_a + n_b) k_z (n_z - m_z) + J]}, \quad (4.19)$$

gde je:

$$J = \begin{cases} 1. \quad a^a k_z (n_l - m_l), & n_l - m_l < n_a \\ 2. \quad a^a k_z (n_a - 1) + a k_z, & n_l - m_l = n_a \\ 3. \quad a^a k_z (n_a - 1) + a k_z + a^b k_z (n_l - m_l - n_a), & n_a < n_l - m_l < n_a + n_b \\ 4. \quad a^a k_z (n_a - 1) + a^b k_z (n_b - 1) + 2 a k_z, & n_l - m_l = n_a + n_b \end{cases} \quad (4.20)$$

Tako, za $n_l = 0$, jednačina kretanja, nakon izvršenih transformacija, postaje:

$$\begin{aligned} &\frac{1}{N_x N_y N_z} \sum_{k_x k_y k_z} e^{i[a_x k_x (n_x - m_x) + a_y k_y (n_y - m_y) + \tilde{a}(n_a + n_b) k_z (n_z - m_z)]} \times \\ &\times \left\{ \left[\hbar\omega - \Delta^a + W_x^a (e^{ia_x k_x} + e^{-ia_x k_x}) + W_y^a (e^{ia_y k_y} + e^{-ia_y k_y}) \right] G_{0;m_l} + \right. \\ &+ W e^{ik_z[-(n_a-1)a^a - (n_b-1)a^b - 2a + a^a(n_a-1) + a + a^b(n_b-1)]} G_{n_a+n_b-1;m_l} + \\ &\left. + W^a e^{ia^a k_z} G_{1;m_l} - \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{0,m_l} \right\} = 0, \end{aligned} \quad (4.21)$$

odnosno (indeks m je „parazitski” pa se može izostaviti):

$$\begin{aligned} &[\hbar\omega - \Delta^a + 2W_x^a \cos a_x k_x + 2W_y^a \cos a_y k_y] G_0 + \\ &+ W e^{-ia k_z} G_{n_a+n_b-1} + W^a e^{ia^a k_z} G_1 = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_0. \end{aligned} \quad (4.22)$$

Ponavljujući isti postupak izračunavanja za svaki sloj, dobija se sistem od $n_a + n_b$ nehomogenih algebarsko-diferencnih jednačina, sa isto toliko nepoznatih Grinovih funkcija:

$$\begin{aligned}
[\hbar\omega - \Delta^a + 2(W_x^a \cos a_x k_x + W_y^a \cos a_y k_y)] G_0 &+ \\
&+ W G_{n_a+n_b-1} e^{-i a k_z} + W^a G_1 e^{i a^a k_z} = \frac{i \hbar}{2\pi} \delta_0 \\
[\hbar\omega - \Delta^a + 2(W_x^a \cos a_x k_x + W_y^a \cos a_y k_y)] G_1 &+ \\
&+ W^a (G_0 e^{-i a^a k_z} + G_2 e^{i a^a k_z}) = \frac{i \hbar}{2\pi} \delta_1 \\
&\quad * \quad * \quad * \\
[\hbar\omega - \Delta^a + 2(W_x^a \cos a_x k_x + W_y^a \cos a_y k_y)] G_{n_a-2} &+ \\
&+ W^a (G_{n_a-3} e^{-i a^a k_z} + G_{n_a-1} e^{i a^a k_z}) = \frac{i \hbar}{2\pi} \delta_{n_a-2} \\
[\hbar\omega - \Delta^a + 2(W_x^a \cos a_x k_x + W_y^a \cos a_y k_y)] G_{n_a-1} &+ \\
&+ W^a G_{n_a-2} e^{-i a^a k_z} + W G_{n_a} e^{i a k_z} = \frac{i \hbar}{2\pi} \delta_{n_a-1} \\
[\hbar\omega - \Delta^b + 2(W_x^b \cos a_x k_x + W_y^b \cos a_y k_y)] G_{n_a} &+ \\
&+ W G_{n_a-1} e^{-i a k_z} + W^b G_{n_a+1} e^{i a^b k_z} = \frac{i \hbar}{2\pi} \delta_{n_a} \\
[\hbar\omega - \Delta^b + 2(W_x^b \cos a_x k_x + W_y^b \cos a_y k_y)] G_{n_a+1} &+ \\
&+ W^b (G_{n_a} e^{-i a^b k_z} + G_{n_a+2} e^{i a^b k_z}) = \frac{i \hbar}{2\pi} \delta_{n_a+1} \\
&\quad * \quad * \quad * \\
[\hbar\omega - \Delta^b + 2(W_x^b \cos a_x k_x + W_y^b \cos a_y k_y)] G_{n_a+n_b-2} &+ \\
&+ W^b (G_{n_a+n_b-3} e^{-i a^b k_z} + G_{n_a+n_b-1} e^{i a^b k_z}) = \frac{i \hbar}{2\pi} \delta_{n_a+n_b-2} \\
[\hbar\omega - \Delta^b + 2(W_x^b \cos a_x k_x + W_y^b \cos a_y k_y)] G_{n_a+n_b-1} &+ \\
&+ W^b G_{n_a+n_b-2} e^{-i a^b k_z} + W + G_0 e^{i a k_z} = \frac{i \hbar}{2\pi} \delta_{n_a+n_b-1} .
\end{aligned} \tag{4.23}$$

Kako indeks l prebrojava $n_a + n_b$ neekvivalentnih kristalnih čvorova unutar osnovnog lanca superrešetke, postoji samo $n_a + n_b$ različitih transformacija Grinovih funkcija. Stoga je pri pisanju navedenog sistema jednačina iskorišćena relacija:

$$G_{n_x n_y n_z n_l + (n_a + n_b)} = G_{n_x n_y n_z n_l} . \tag{4.24}$$

Uvodeći sledeće smene i pojednostavljenje modela:

$$\left. \begin{array}{l} a^a = a^b = \tilde{a} = a = a_z \\ a_x^{a/b} = a_y^{a/b} = a_z = a \end{array} \right\} \text{model proste kubne rešetke}$$

$$\Delta^a \equiv \Delta , \quad \Delta^b = \varepsilon \Delta ,$$

$$\frac{W_{x/y}^a}{W} = \frac{W^a}{W} = \alpha , \quad \frac{W_{x/y}^b}{W} = \frac{W^b}{W} = \beta , \tag{4.25}$$

$$F = 2(\cos a k_x + \cos a k_y) \in [-4, 4] ,$$

determinanta sistema se može napisati u sledećoj formi:

$$\left[\begin{array}{ccc|ccc|ccc} \varrho_\alpha & \alpha e^{iak_z} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e^{-iak_z} \\ \alpha e^{-iak_z} & \varrho_\alpha & \alpha e^{iak_z} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \alpha e^{-iak_z} & \varrho_\alpha & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ - & - & - & - & - & - & - & - & - \\ 0 & 0 & 0 & \alpha e^{iak_z} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \varrho_\alpha & e^{iak_z} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-iak_z} & \varrho_\beta & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \beta e^{-iak_z} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ - & - & - & - & - & - & - & - & - \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \varrho_\beta & \beta e^{iak_z} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \beta e^{-iak_z} & \varrho_\beta & \beta e^{iak_z} & 0 \\ e^{iak_z} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \beta e^{-iak_z} & \varrho_\beta \end{array} \right]_{N_{II}} \quad (4.26)$$

gde su $\varrho_\alpha = \frac{\hbar\omega - \Delta}{W} + \alpha F$, $\varrho_\beta = \frac{\hbar\omega - \varepsilon\Delta}{W} + \beta F$ i $N_{II} = (n_a + n_b) \times (n_a + n_b)$.

Nepoznatih $n_a + n_b$ Grinovih funkcija određuju se formulom

$$G_{m_z} = \frac{D_{m_z}}{D}, \quad (4.27)$$

gde je D_{m_z} determinanta promenljive, a D determinanta sistema. Polovi Grinovih funkcija pomoću kojih se određuje zakon disperzije elektrona dobijaju se iz uslova da je determinanta sistema (4.23) jednaka nuli [131,135].

4.1.1 Model proste superrešetke

Ovde je analizirana tzv. prosta superrešetka - izgradjena od filmova (sa n_a odnosno n_b slojeva) istih atoma gde su $\Delta^a = \Delta^b = \Delta$ (ova aproksimacija je dozvoljena jer su Δ^a i Δ^b u većini konkretnih slučajeva približno jednaki \sim eV [136]) i, shodno tome, $W^a = W^b = \tilde{W}$. Energija transfera elektrona izmedju filmova je različita od energije transfera unutar filma, tj. $W \neq \tilde{W}$.

Determinanta (4.26) u ovom slučaju može se napisati u obliku [135]:

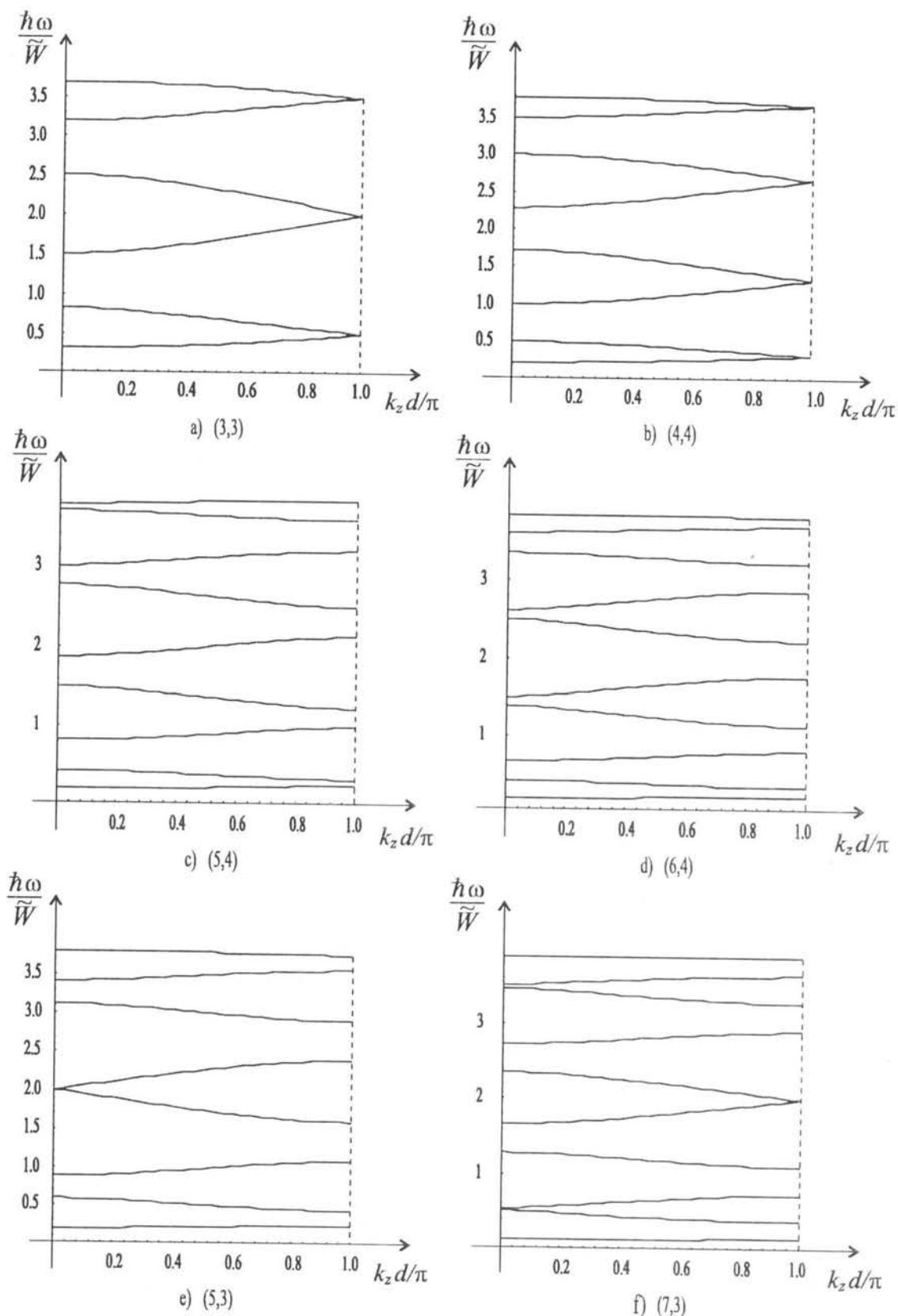
$$\begin{aligned} D = & \alpha^{(n_a+n_b)} \mathcal{P}_{n_a} \left(\frac{\varrho}{\alpha} \right) \mathcal{P}_{n_b} \left(\frac{\varrho}{\alpha} \right) - 2\alpha^{(n_a+n_b-2)} \mathcal{P}_{n_a-1} \left(\frac{\varrho}{\alpha} \right) \mathcal{P}_{n_b-1} \left(\frac{\varrho}{\alpha} \right) + \\ & + \alpha^{(n_a+n_b-4)} \mathcal{P}_{n_a-2} \left(\frac{\varrho}{\alpha} \right) \mathcal{P}_{n_b-2} \left(\frac{\varrho}{\alpha} \right) + (-1)^{(n_a+n_b+1)} \alpha^{(n_a+n_b-2)} 2 \cos [(n_a + n_b)ak_z], \end{aligned} \quad (4.28)$$

gde su \mathcal{P}_n karakteristični polinomi Čebiševa (videti u dodatku 6.2).

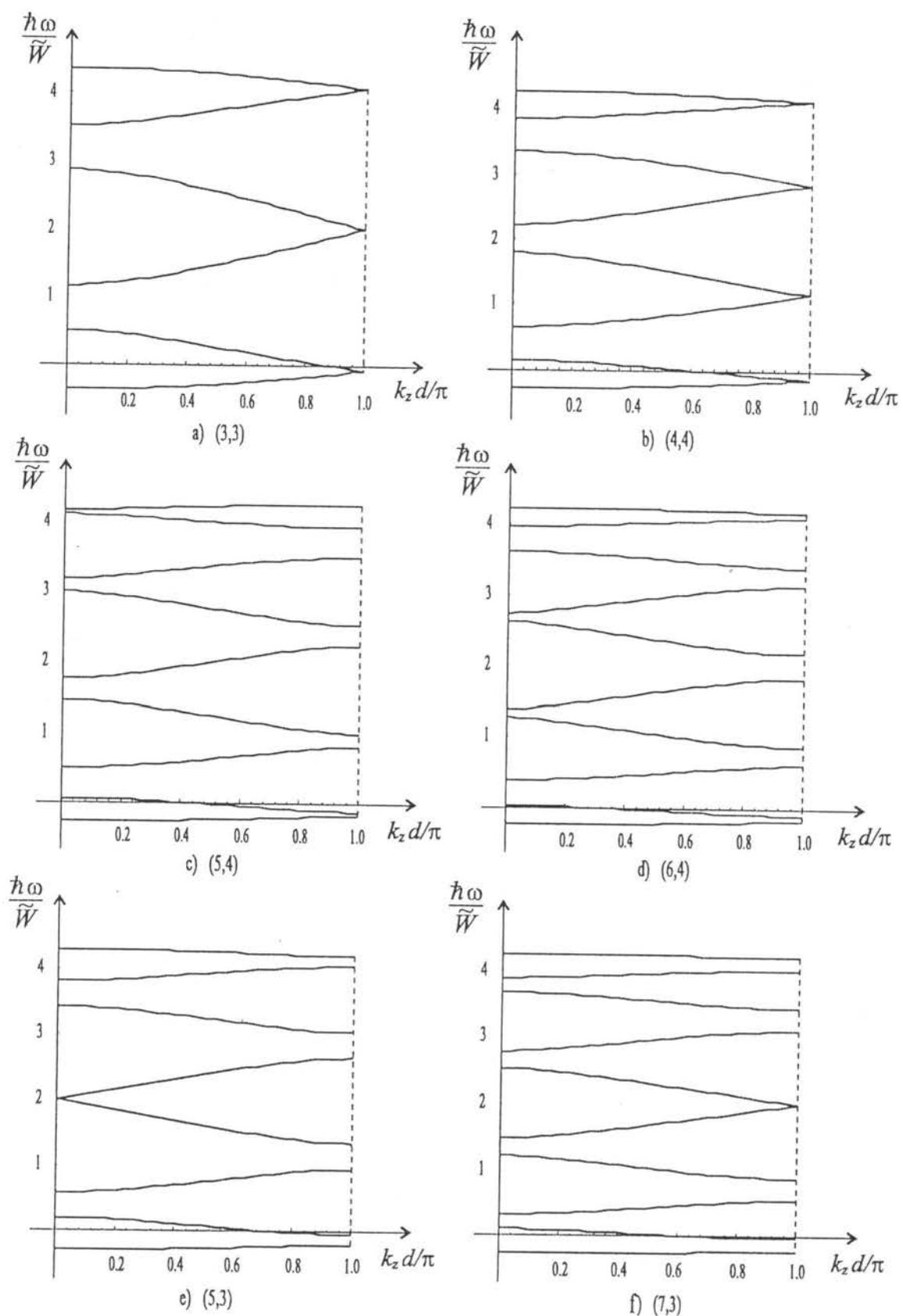
Uslov za nalaženje zakona disperzije $D = 0$ je, u generalnom slučaju, analitički nerešiv²⁵, te je zakon disperzije analiziran numeričkim putem. Posmatraju se različite kombinacije n_a i n_b , promena odnosa energije transfera izmedju i unutar filmova, kao i različite vrednosti komponenta talasnih vektora duž x i y pravaca.

Na slikama 4.2a-f i 4.3a-f i tabelama 4.1 i 4.2 prikazani su zakoni disperzije elektrona u superrešetkama sa filmovima različitih debljina. Ovde je razmatran samo centar I Briluenove zone gde je $F = 4$, odnosno $k_x = k_y = 0$.

²⁵Ovaj uslov može se rešiti analitički jedino za konkretnе slučajeve (određen broj slojeva) [135]. Naravno to usporava analizu, pa su zato primenjene numeričke metode.



Slika 4.2: Zakon disperzije elektrona za $W = 0.5\tilde{W}$
(pojava donjeg energetskog gepa i zabranjenih energetskih zona)



Slika 4.3: Zakon disperzije elektrona za $W = 1.5\tilde{W}$
(pojava lokalizovanih elektronskih stanja)

$k_z \frac{d}{\pi}$	$\frac{\hbar\omega}{\tilde{W}}$					
0.0	0.314	0.814	1.500	2.500	3.186	3.686
0.1	0.316	0.808	1.508	2.492	3.192	3.684
0.2	0.322	0.790	1.532	2.468	3.210	3.678
0.3	0.331	0.763	1.568	2.432	3.237	3.669
0.4	0.345	0.730	1.615	2.385	3.270	3.655
0.5	0.362	0.693	1.670	2.330	3.307	3.638
0.6	0.383	0.653	1.730	2.270	3.347	3.617
0.7	0.408	0.613	1.794	2.206	3.387	3.592
0.8	0.436	0.574	1.861	2.139	3.426	3.564
0.9	0.466	0.536	1.930	2.070	3.464	3.534
1.0	0.500	0.500	2.000	2.000	3.500	3.500

Tabela 4.1: $W = 0.5\tilde{W}$, $n_a = n_b = 3$

$k_z \frac{d}{\pi}$	$\frac{\hbar\omega}{\tilde{W}}$					
0.0	-0.351	0.500	1.149	2.851	3.500	4.351
0.1	-0.348	0.486	1.167	2.833	3.514	4.348
0.2	-0.339	0.446	1.215	2.785	3.554	4.339
0.3	-0.324	0.391	1.285	2.715	3.609	3.324
0.4	-0.303	0.327	1.370	2.630	3.673	4.303
0.5	-0.276	0.259	1.465	2.535	3.749	4.276
0.6	-0.244	0.190	1.566	2.434	3.810	4.244
0.7	-0.206	0.123	1.671	2.329	3.877	4.206
0.8	-0.163	0.058	1.780	2.220	3.942	4.163
0.9	-0.115	-0.004	1.889	2.111	4.004	4.115
1.0	-0.062	-0.062	2.000	2.000	4.062	4.062

Tabela 4.2: $W = 1.5\tilde{W}$, $n_a = n_b = 3$

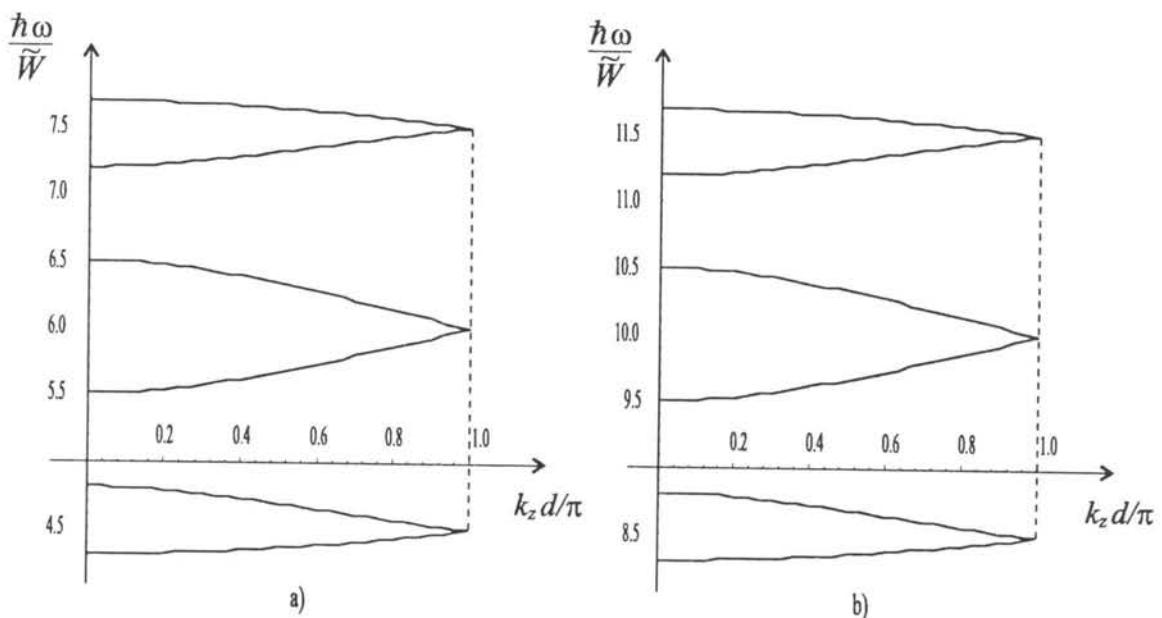
Analizom prikazanih grafika²⁶ i tabela uočene su sledeće karakteristike zakona disperzije elektrona u superrešetkama. Usled narušenja translacione simetrije duž z -pravca, kontinualna zona balka cepa se na niz podzona (minizone) međusobno razdvojenih zabranjenim zonama (minigepovi) [1,27,137,138].

- U slučaju kada je transfer elektrona između filmova slabiji od transfera unutar filma (slika 4.2a-f i tabela 4.1) javljaju se zabranjene energetske zone od kojih se najniža i najviša (po analogiji sa modelom kristalnog filma [73,75]) mogu nazvati donji i gornji energetski gep. Celokupna disperziona kriva leži unutar balkovske energetske zone ($\frac{\hbar\omega}{\tilde{W}} \in [0, 4]$), tj. dolazi do sužavanja energetske zone elektrona u superrešetki. To je direktna posledica smanjenja energije elektronskog transfera (što je pokazano u slučaju kristalnog filma).
- Pri intenzivnijem transferu elektrona između filmova ($W > \tilde{W}$) dolazi do širenja energetske zone van balkovskih granica i do pojave lokalizovanih stanja (slika 4.2a-f i tabela 4.2). Za razliku od modela kristalnog filma gde se javljaju diskretna stanja, kod superrešetke egzistiraju kvazikontinualne disperzije podgrane lokalizovanih stanja (ispod

²⁶Pored prikazanih ispitani su još neki slučajevi radi egzaktnije analize.

douje i iznad gornje granice balkovske energetske zone), što je posledica neograničenosti sistema i duž z pravca.

- U slučaju simetrične superrešetke ($n_a = n_b$ sa istim atomima $a = b$, slike 4.2a/b i 4.3a/b tabela 4.1 i 4.2) disperzije podgrane se medjusobno spajaju na granici I Briluenove zone ($k_z = \frac{\pi}{2n_a a}$), tj. promenom samo elektronskog transfera između identičnih kristalnih filmova ne dolazi do pojave zabranjenih zona na granici prve Briluenove zone ($k_z^{max} = \frac{\pi}{(n_a + n_b)\tilde{a}}$), već do pojave nultog energetskog gепа [1,125]. Osnovni motiv koji se ponavlja periodično duž z pravca nije više dvostruki film dužine $n_a + n_b = 2n_a$, jer su filmovi medjusobno jednaki. Konstanta periodičnosti duž z pravca je duplo kraća u odnosu na opšti slučaj ($\frac{n_a + n_b}{2} = n_a$). Redefinisanjem granice prve Briluenove zone superrešetke ($k_z^{r,max} = \frac{\pi}{n_a \tilde{a}}$), grafički prikaz zakona disperzije bi pokazao da se zabranjene zone javljaju za $k_z = 0$ kao i za $k_z = k_z^{r,max}$, dok bi broj disperzionih grana bio duplo manji.
- Ukoliko je zbir slojeva filmova $n_a + n_b$ neparan (slike 4.2c i 4.3c) dolazi do pojave simetrije disperzionih grana u odnosu na tačku ($k_z = \frac{\pi}{2a(n_a + n_b)}$, $\frac{\hbar\omega}{\tilde{W}} = 2$), a ukoliko je paran (slike 4.2a,b,d-f i 4.3a,b,d-f) javlja se simetrija u odnosu na pravu $\frac{\hbar\omega}{\tilde{W}} = 2$.
- Za superrešetku sa neparnim brojevima n_a i n_b dobija se spajanje centralnih disperzionih grana u tački ($k_z = 0$, $\frac{\hbar\omega}{\tilde{W}} = 2$) ukoliko je $\frac{n_a + n_b}{2}$ parno (slike 4.2e i 4.3e), odnosno spajanje u tački ($k_z = \frac{\pi}{a(n_a + n_b)}$, $\frac{\hbar\omega}{\tilde{W}} = 2$) ako je $\frac{n_a + n_b}{2}$ neparno (slike 4.2a,f i 4.3a,f). Kod superrešetke sa parnim brojevima n_a i n_b , pri čemu je $n_a \neq n_b$ ne dolazi do spajanja disperzionih grana, kako u centru tako ni na granicama prve Briluenove zone.



Slika 4.4: Zakon disperzije elektrona pri $W = 0.5\tilde{W}$ (a: $k_x = k_y = \frac{\pi}{2a}$, b: $k_x = k_y = \frac{\pi}{a}$)

Analizom zakona disperzije za $k_x = k_y > 0$ nije uočena promena forme i medjusobnog položaja disperzionih krivih, već samo translatorno pomeranje spektra ka višim energijama (iako

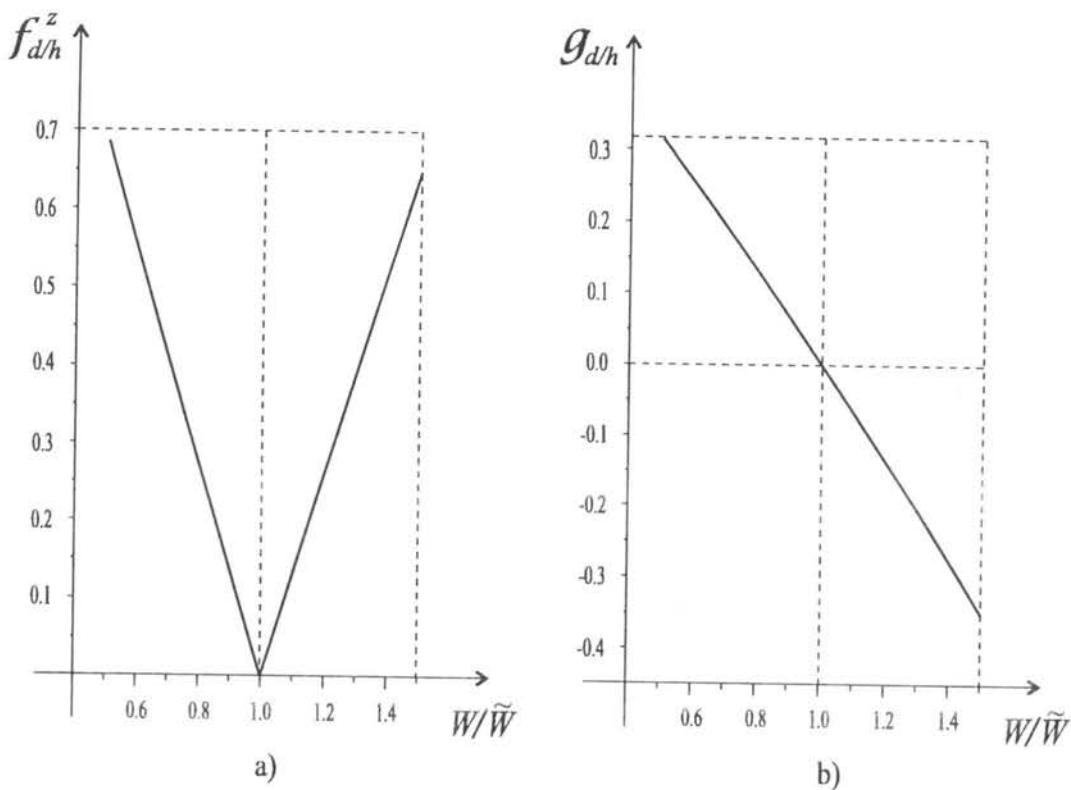
su analize izvršene za veći broj slučajeva, na slici 4.4 grafički je prikazana samo superrešetka $n_a = n_b = 3$). U slučaju $k_x = k_y = \pi/(2a)$ dobija se $\hbar\omega/\tilde{W} \in [4, 8]$ (slika 4.4a), dok je za $k_x = k_y = \pi/a$: $\hbar\omega/\tilde{W} \in [8, 12]$ (slika 4.4b).

Energetski gepovi i zabranjene zone

Pojava energetskih gepova (g) i zabranjenih minizona (f) analizirana je na najprostijem primeru superrešetke (sastavljena od troslojnih filmova istih atoma) za centar I Briluenove zone. Sljedeća tabela 4.3 i slike 4.5 i 4.6 daju zavisnost širina zabranjenih zona i energetskih gepova od odnosa elektronskih transfera W/\tilde{W} .

$\frac{W}{\tilde{W}}$	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.1	1.2	1.3	1.4	1.5
$g_{d/h}$	0.314	0.254	0.193	0.130	0.066	-0.067	-0.136	-0.206	-0.278	-0.351
$f_{d/h}^z$	0.686	0.546	0.407	0.270	0.134	0.133	0.246	0.394	0.522	0.649

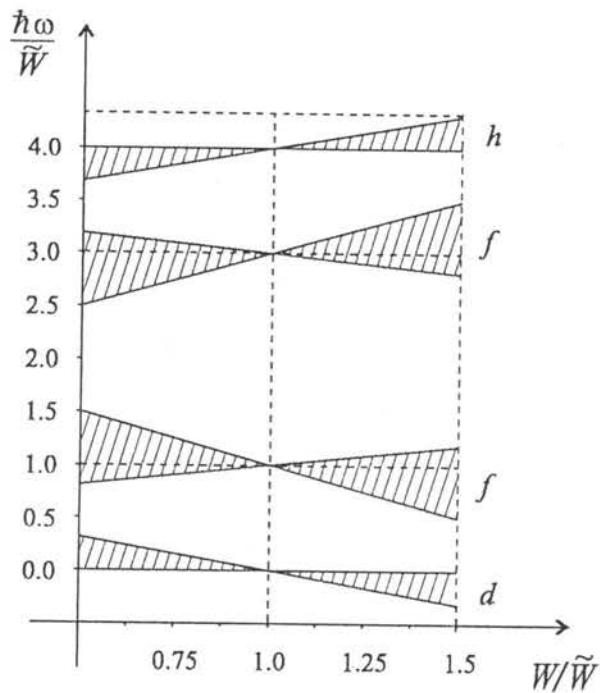
Tabela 4.3: Promena širine zabranjenih zona za $k_z = 0$ sa promenom odnosa W/\tilde{W}



Slika 4.5: Zavisnost širine zabranjenih zona (a) i veličine energetskih gepova (b) od odnosa W/\tilde{W}

Sa ovih slika se vidi da, za posmatrani superrešetku, širine zabranjenih zona linearno zavise od odnosa W/\tilde{W} . Može se reći da je i za energetske gepove ta zavisnost praktično linearna.

Sa slike 4.6 je evidentno da se, kada je energetski transfer izmedju i unutar filmova jednak ($W/\tilde{W} = 1$), zabranjene zone gube, odnosno superrešetka prelazi u film.



Slika 4.6: Promena širine energetskih zona elektrona u zavisnosti od odnosa W/\tilde{W} :

- donji (d) i gornji energetski gep (h)
- zabranjene energetske zone (f)

4.1.2 Model $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ superrešetke

Ovde ćemo prethodnu proceduru izračunavanja primeniti na superrešetku formiranu od naizmenično ponavljajućih n_a slojeva materijala $GaAs$ i n_b slojeva materijala $Al_xGa_{1-x}As$. Postupak računanja potpuno je isti kao za prostu superrešetku, tako da analizu započinjemo od deteminante (4.26), gde su:

$$\varrho_\alpha = \frac{\hbar\omega - \Delta^a}{W} + \alpha F; \quad \varrho_\beta = \frac{\hbar\omega - \Delta^b}{W} + \beta F. \quad (4.29)$$

Veličine α , β i F definisane su na isti način kao u izrazu (4.25), dok se parametri Δ^a , Δ^b , W^a i W^b određuju na osnovu poznавања структуре енергетске зоне полазних материјала који чине superrešetku (уз коришћење поznatih података и relacija за ову врсту superrešetke [122,138]).

Kako je kod материјала који чине ову superrešetku дно проводне зоне значајно (реда 1 eV) енергетски одвојено од врха valentne zone, онда се приликом razmatranja elektronske структуре може узeti u obzir само проводна зона [1]. Pored toga, kako se ови konstituenti ne razlikuju u pogledu kristalne структуре i rešetkine konstante [1,138], онда се може реći да odgovarajuće величине (енергетски процеп, ефективна маса, ...) линеарно зависе од molskog udela x .

Ovde су проводни elektroni ова два материјала tretirani као слободни гас у ravni paralelenoj površinama i okarakterisani su ефективним masama [1,3,138]:

$$m_a (GaAs) = 0.067m_0; \quad m_b (Al_xGa_{1-x}As) = m_a + 0.083m_0,$$

где је m_0 ефективна маса elektrona. Korišćenjem енергетског закона disperzije balkovskih kristala за degenerisan elektronski гас (2.46), односно relacije (2.47), можемо izraziti energije

elektronskog transfera unutar polaznih materijala [129,130]:

$$W^a = \frac{\hbar^2}{2m_a a^2}; \quad W^b = \frac{\hbar^2}{2m_b a^2}. \quad (4.30)$$

Energiju elektronskog transfera izmedju razlicitih materijala (filmova) procenićemo da leži u intervalu:

$$W = \frac{W^a + W^b}{2} + p \left| \frac{W^a - W^b}{2} \right|, \quad (4.31)$$

gde je p - parametar koji određuje veličinu energetskog transfera W u odnosu na $W^{a/b}$.

Parametre Δ^a i Δ^b odredićemo na osnovu balkovske diperzije relacije u dugotalasnoj aproksimaciji (2.46), koja u opštem slučaju ima oblik: $E = \Delta - 6W + Wk^2a^2$. Na taj način može se definisati energije dna provodnih zona oba materijala (posmatrano za tzv. Γ tačku²⁷ Briluenove zone tj. $k_x = k_y = k_z = 0$):

$$E_c^{a/b} = \Delta^{a/b} - 6W^{a/b} \Rightarrow E_c^b - E_c^a = \Delta^b - \Delta^a - 6(W^b - W^a) = V_{off}. \quad (4.32)$$

Veličina V_{off} (band-offset) predstavlja razliku dna provodnih zona i za ovu superrešetku iznosi [122,138]:

$$V_{off}(x) [\text{eV}] = \begin{cases} 1.247x, & x < 0.45 \\ 1.247x + 1.147(x - 0.45)^2, & x > 0.45 \end{cases} \quad (4.33)$$

Kako se Δ^b meri u odnosu na Δ^a , koji je referentni nivo, uzimajući $\Delta^a = 0$ iz (4.32) se dobija:

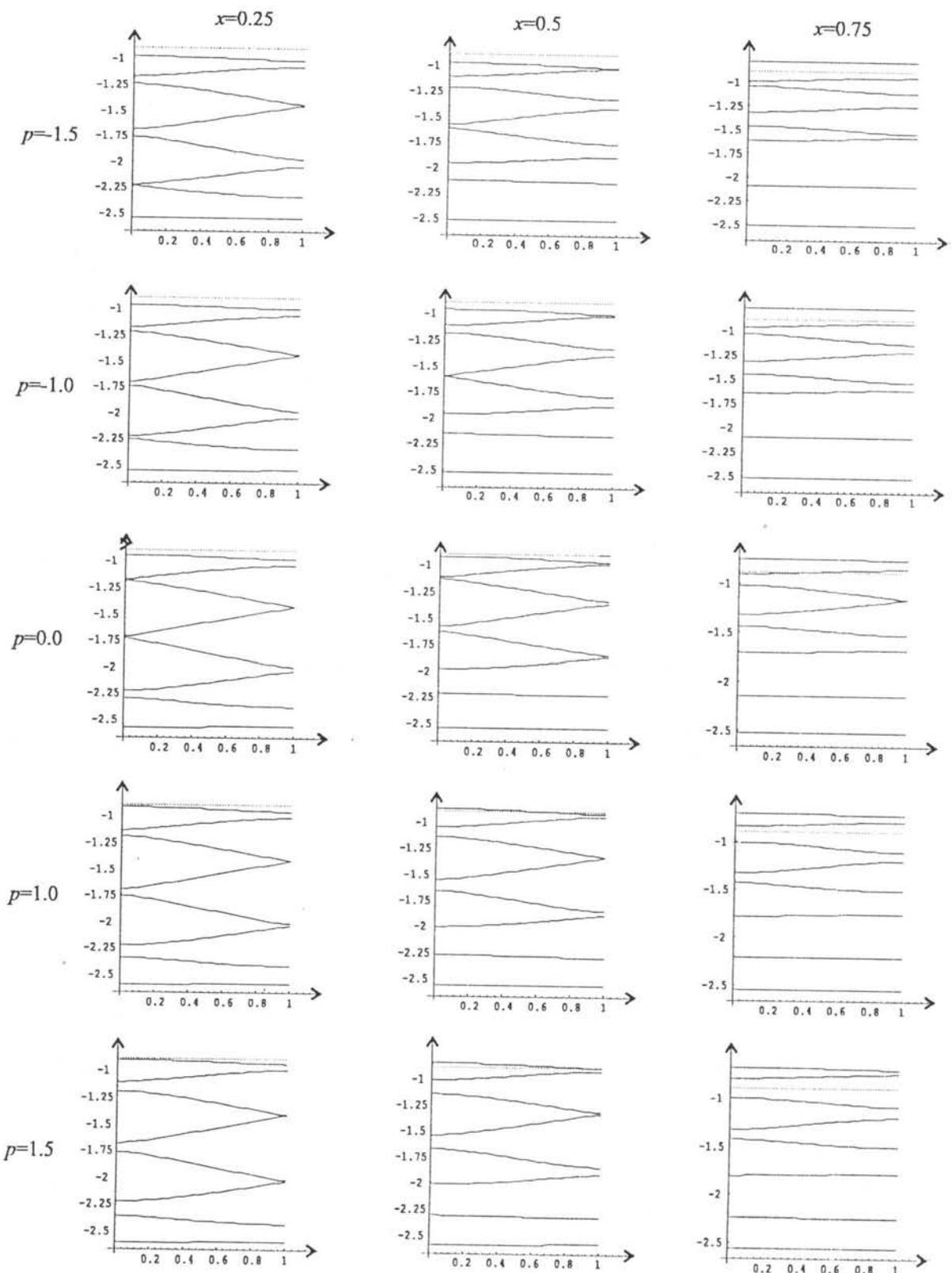
$$\Delta^b = \Delta^a + 6(W^b - W^a) + V_{off} = 6(W^b - W^a) + V_{off}. \quad (4.34)$$

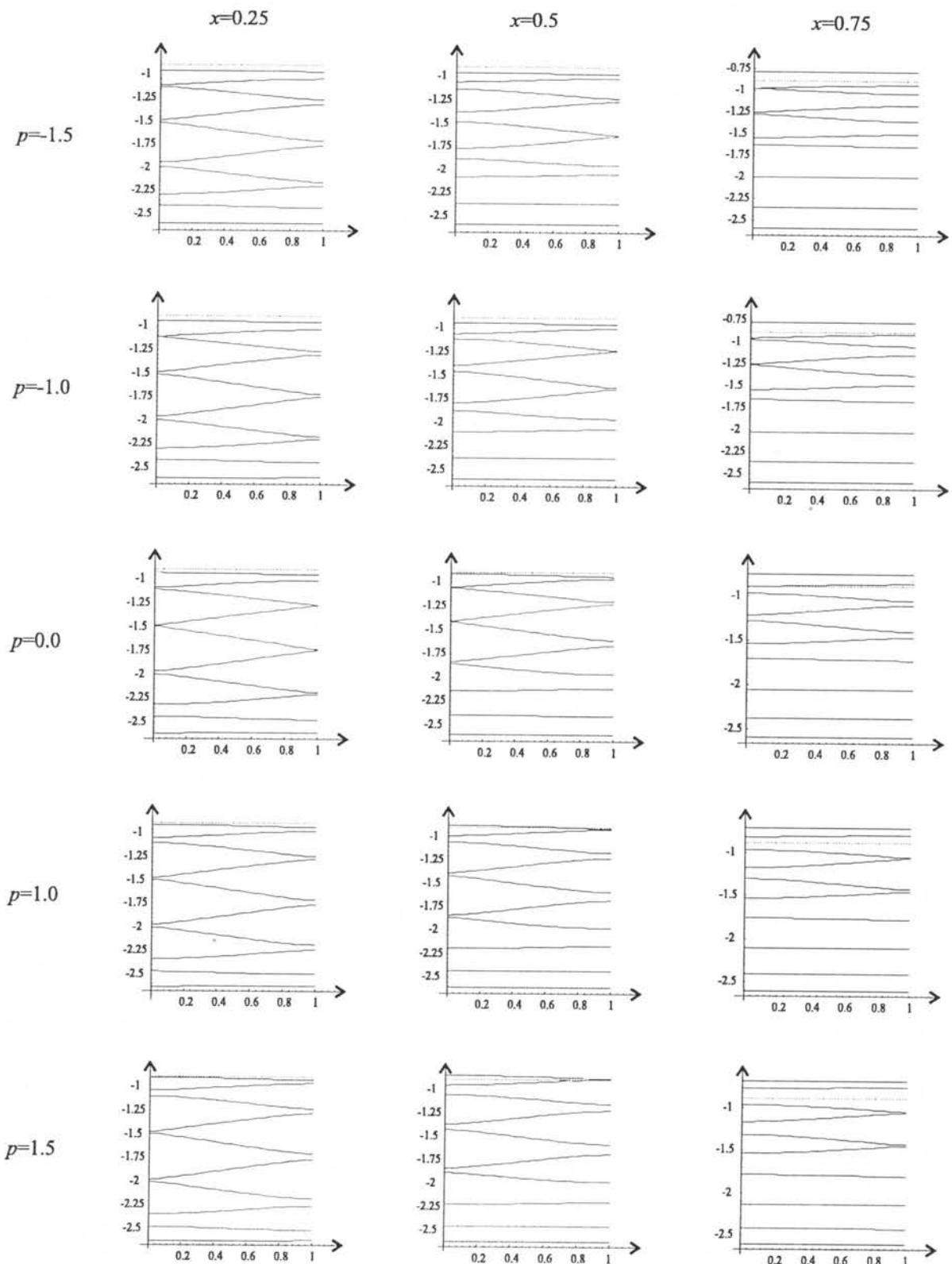
Zakon disperzije se i u ovom slučaju dobija iz uslova da je determinanta (4.26) jednaka nuli. Nalažeće analitičko rešenje bi bilo još složenije nego u prethodnom slučaju, te su i ovde primenjene numeričke metode izračunavanja.

U aproksimaciji efektivne mase, $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ superrešetka se može opisati kao niz potencijalnih kvantnih jama, koje odgovaraju $GaAs$, medjusobno razdvojenih $Al_xGa_{1-x}As$ barijerama [121,122,138]. Na taj način, promenom debljine materijala može se uticati na širinu jame, ili na visinu barijere, promenom udela x [1,2], odnosno, promenom mikroskopskih parametara (n_a , n_b , p i x) može se bitno uticati na relevantne makroskopske karakteristike posmatrane strukture. Ukoliko je $x > 0.88$ jame i barijere menjaju mesta [1]. Stoga je ovde za razne kombinacije broja slojeva (n_a i n_b), odnosno debljine ($d = a(n_a + n_b)$), prvog i drugog materijala menjani parametar x ($x \in \{0.25, 0.5, 0.75\}$). Takodje je menjani i parametar p ($p \in \{-1.5, -1, 0, 1, 1.5\}$) koji opisuje veličinu interakcije izmedju filmova W . Ova interakcija, koja se u literaturi помиње kao parametar kuplovanja elektrona izmedju materijala [129,130], pokazuje bitan uticaj na transportne i transmisione karakteristike superrešetke [129,130,139,140].

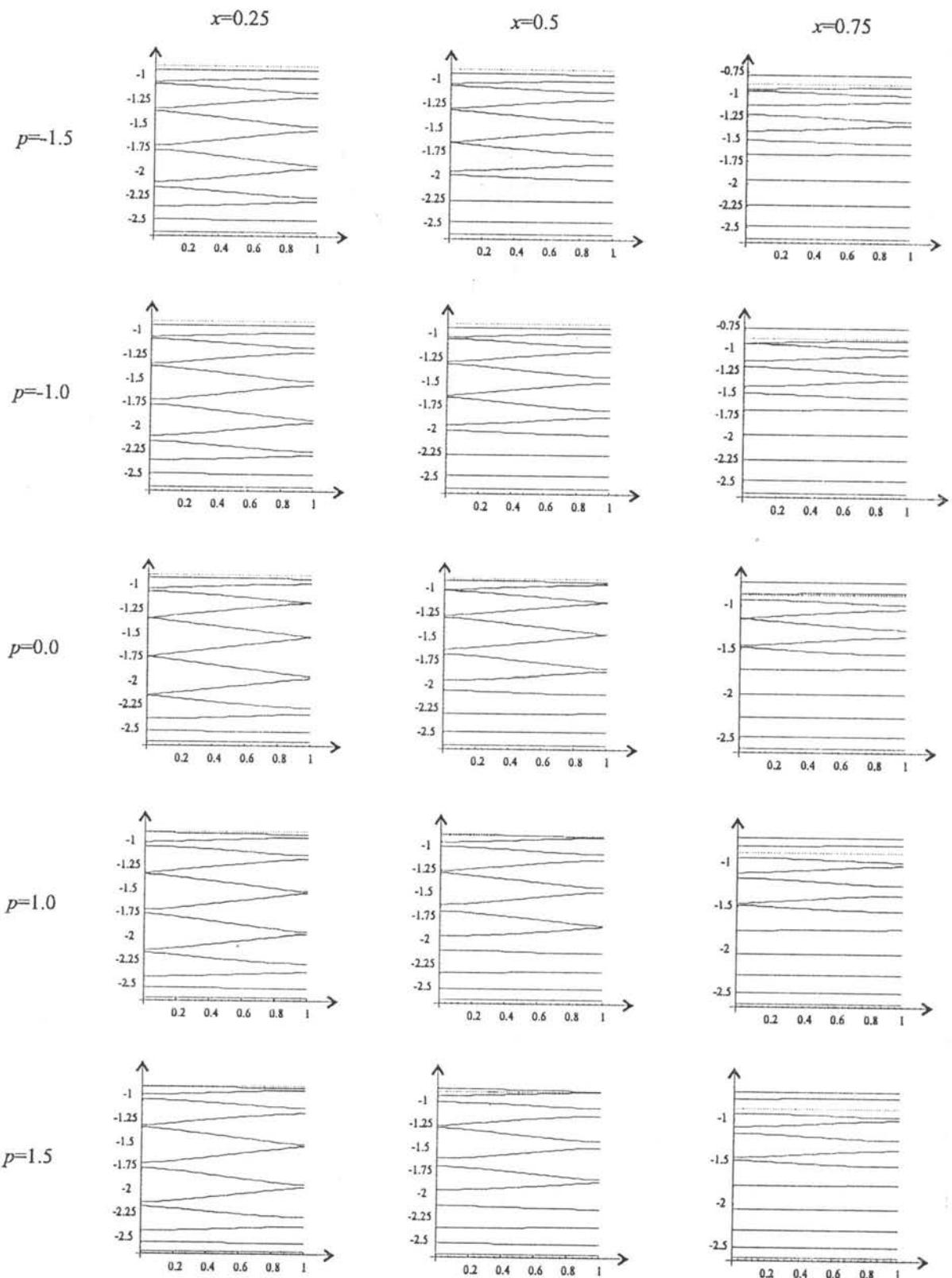
Od ogromnog broja analiza (analizirano je oko 180 razlicitih slučajeva) izdvojeni su i grafički prikazani samo neki karakteristični, na sledećim slikama (4.7-4.9). Grafici na pomenutim slikama predstavljaju zakon disperzije elektrona (zavisnost $E = E(k_z)$) u zavisnosti od karakterističnih parametara posmatrane superrešetke (visine barijere, broja slojeva i elektronskog transfera izmedju materijala). Na apscisama ovih grafika nalazi se veličina $k_z d / \pi \in [0, 1]$, dok se na ordinatama nalazi energija elektrona E izražena u eV.

²⁷Kod ove superrešetke ekvipotencijalne površine oko Γ minimuma su sfere, a broj elektrona iznad ovih minimuma je zanemarljiv [1].

Slika 4.7: Zakon disperzije za superrešetku sa $n_a = n_b = 4$



Slika 4.8: Zakon disperzije za superrešetku sa $n_a = 6$ i $n_b = 4$

Slika 4.9: Zakon disperzije za superrešetku sa $n_a = 8$ i $n_b = 4$

Analizirajući energetski spektar elektrona u $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ superrešetkama došlo se do sledećih zaključaka.

- Energetska zona se, kao i kod proste superrešetke, cepa na niz dipserzionih grana (jednak ukupnom broju slojeva superrešetke). Međutim, pored kvazikontinualnih minizona (grupisanih na višim energijama), ovde se javljaju stanja (na nižim energijama) koja praktično ne zavise od z komponente talasnog vektora. Stoga se ta stanja mogu interpretirati kao diskretna stanja kvantne jame [127,141].
- Povećanjem širine kvantne jame (broja slojeva n_a) broj diskretnih stanja se povećava, a rastojanje medju njima smanjuje (što je karakteristično ponašanje za stanja u kvantnoj jami [1,16]). Na taj način ona mogu dostići dovoljnu energiju da preskoče jamu. S druge strane, širina kontinualnih minizona se smanjuje kako povećanjem širine jame, tako i povećanjem širine barijere (broja slojeva n_b), dok se širina zabranjenih zona istovremeno povećava [1,2,121-128].
- Povećanjem parametra x (visine barijere) broj diskretnih nivoa se povećava, tako da pri $x = 0.75$ ona zauzimaju (donju) polovinu celokupne energetske zone superrešetke. Pored toga, širina kontinualnih minizona, kao i njihov broj, opada sa povećanjem x , dok se ceo spektar širi ka većim energijama. Na taj način, neki od kontinualnih nivoa izlaze van gornje granice balkovske energetske zone $GaAs$ ²⁸.
- Ukoliko se energetski transfer izmedju filmova povećava (parametar p), ceo energetski spektar se širi. Pored toga, ovaj parametar utiče na spajanje (degeneraciju) i razdvajanje pojedinih disperzionih grana. Naime, povećanjem p pojedine disperzionalne grane teže da se spoje, bilo na granici ili u centru I Briluenove zone, sve do neke tzv. kritične vrednosti parametra p_c pri kojoj dolazi do njihovog spajanja (pojave nultog energetskog gепа [1,125]). Nakon toga, daljim povećanjem p ove grane se razdavljaju. Ta kritična vrednost parametra, kao što će kasnije biti pokazano, ima uticaj na prostornu raspodelu elektrona.

4.2 Prostorna raspodela elektrona u superrešetkama

Prostorna raspodela elektrona, tj. verovatnoće nalaženja na pojedinim slojevima superrešetke, nalazi se sličnim postupkom kao u slučaju kristalnog filma. Polazi se od sistema jednačina za elektronske Grinove funkcije (4.23), napisanog matričnom obliku: $\hat{D}\tilde{\mathcal{G}} = \tilde{\mathcal{K}}$, gde su: \hat{D} - matrica reda $(n_a + n_b) \times (n_a + n_b)$ koja odgovara determinanti (4.26) D , a $\tilde{\mathcal{G}}$ and $\tilde{\mathcal{K}}$ su vektori Grinovih funkcija i Kronekerovih simbola:

$$\tilde{\mathcal{G}} = \begin{pmatrix} G_{0;m_l} \\ G_{1;m_l} \\ \vdots \\ G_{n_a-2;m_l} \\ G_{n_a-1;m_l} \\ G_{n_a;m_l} \\ G_{n_a+1;m_l} \\ \vdots \\ G_{n_a+n_b-2;m_l} \\ G_{n_a+n_b-1;m_l} \end{pmatrix}, \quad \tilde{\mathcal{K}} = \frac{i\hbar}{2\pi W} \begin{pmatrix} \delta_{0;m_l} \\ \delta_{1;m_l} \\ \vdots \\ \delta_{n_a-2;m_l} \\ \delta_{n_a-1;m_l} \\ \delta_{n_a;m_l} \\ \delta_{n_a+1;m_l} \\ \vdots \\ \delta_{n_a+n_b-2;m_l} \\ \delta_{n_a+n_b-1;m_l} \end{pmatrix}.$$

²⁸Energetska zona beskonačnog kristala $GaAs$ procenjena je, za konstantu rešetke ~ 1 nm, iz balkovske relacije: $E_{min} = \Delta^a - 6W^a = -2.67$ eV i $E_{max} = \Delta^a - 2W^a = -0.89$ eV.

Dejstvom inverzne matrice \hat{D}^{-1} sledi: $\tilde{\mathcal{G}} = \hat{D}^{-1}\tilde{\mathcal{K}}$, a kako se inverzna matrica može izraziti preko dijagonalne čiji su članovi D_{ij} kofaktori elemenata d_{ij} direktnе matrice, tako možemo pisati:

$$G_{n_l; m_l} = \frac{1}{D} \sum_q D_{n_l; q_l} K_{q_l; m_l} = \frac{1}{D} \frac{i\hbar}{2\pi W} \sum_q D_{n_l; q_l} \delta_{q_l; m_l}. \quad (4.35)$$

Kronekerova δ skida sume pri čemu izjednačuje indekse q_l i m_l . Za traženu Grinovu funkciju se tako dobija:

$$G_{n_l; m_l} = \frac{i\hbar}{2\pi W} \frac{D_{n_l; m_l}}{D}. \quad (4.36)$$

Kofaktori $D_{n_l; m_l}$ se izračunavaju na osnovu poznavanja determinante sistema D . Kao kod kristalnih film-struktura i ovde računamo samo dijagonalne Grinove funkcije $G_{n_l; n_l}$ (računaju se samo dijagonalni kofaktori $D_{n_l; n_l}$). Grinove funkcije su multipolne, jer se u imeniku nalazi polinom D reda $(n_a + n_b) \times (n_a + n_b)$. Stoga se mora pribegnuti faktorizaciji na proste polove;

$$G_{n_l; n_l} = \frac{i\hbar}{2\pi W} \sum_{\nu=1}^{(n_a+n_b) \times (n_a+n_b)} \frac{g_{n_l; n_l}(\varrho_\nu)}{\varrho - \varrho_\nu}, \quad (4.37)$$

pri čemu se spektralne težine $g_{n_l; n_l}(\varrho)$ izračunavaju kao:

$$g_{n_l; n_l}(\varrho) = \frac{D_{n_l; n_l}(\varrho_\nu)}{\frac{d}{d\varrho} D(\varrho)|_{\varrho=\varrho(\nu)}}. \quad (4.38)$$

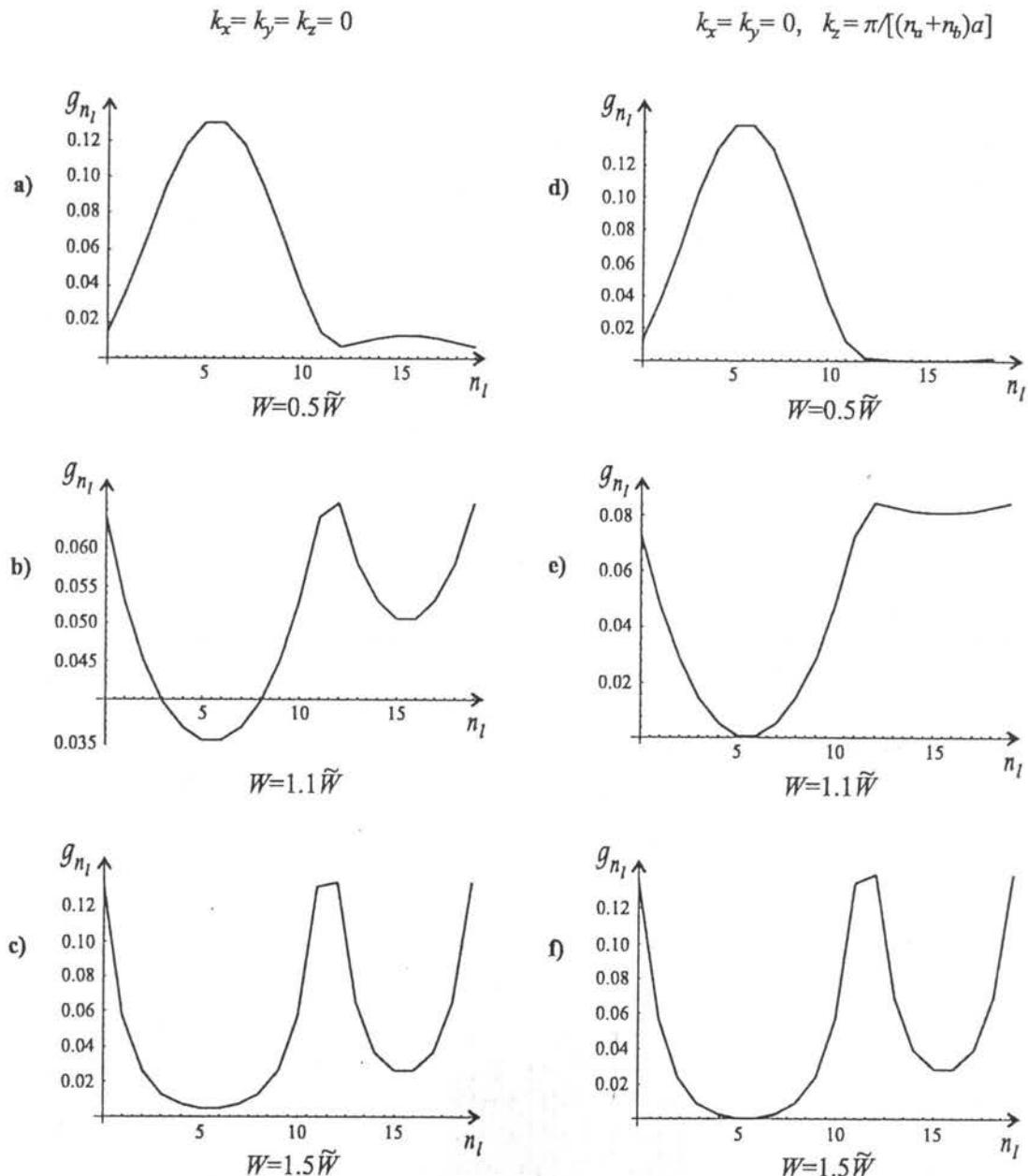
4.2.1 Spektralne težine proste superrešetke

Iz izraza (4.38) računamo spektralne težine elektrona stavljajući (pošto je u pitanju prosta superrešetka) u determinantu (4.26) $\varrho_\alpha = \varrho_\beta = \varrho$. Numeričkim metodama izračunate su prostorne raspodele elektrona u prostim superrešetkama, kako za centar I Briluenove zone ($k_x = k_y = k_z = 0$, što je prikazano na slikama 4.10a-c i 4.11a-c), tako i za njenu granicu duž z-pravca ($k_x = k_y = 0$, $k_z = \frac{\pi}{(n_a + n_b)\tilde{a}}$, što je prikazano na slikama 4.10d-f i 4.11d-f).

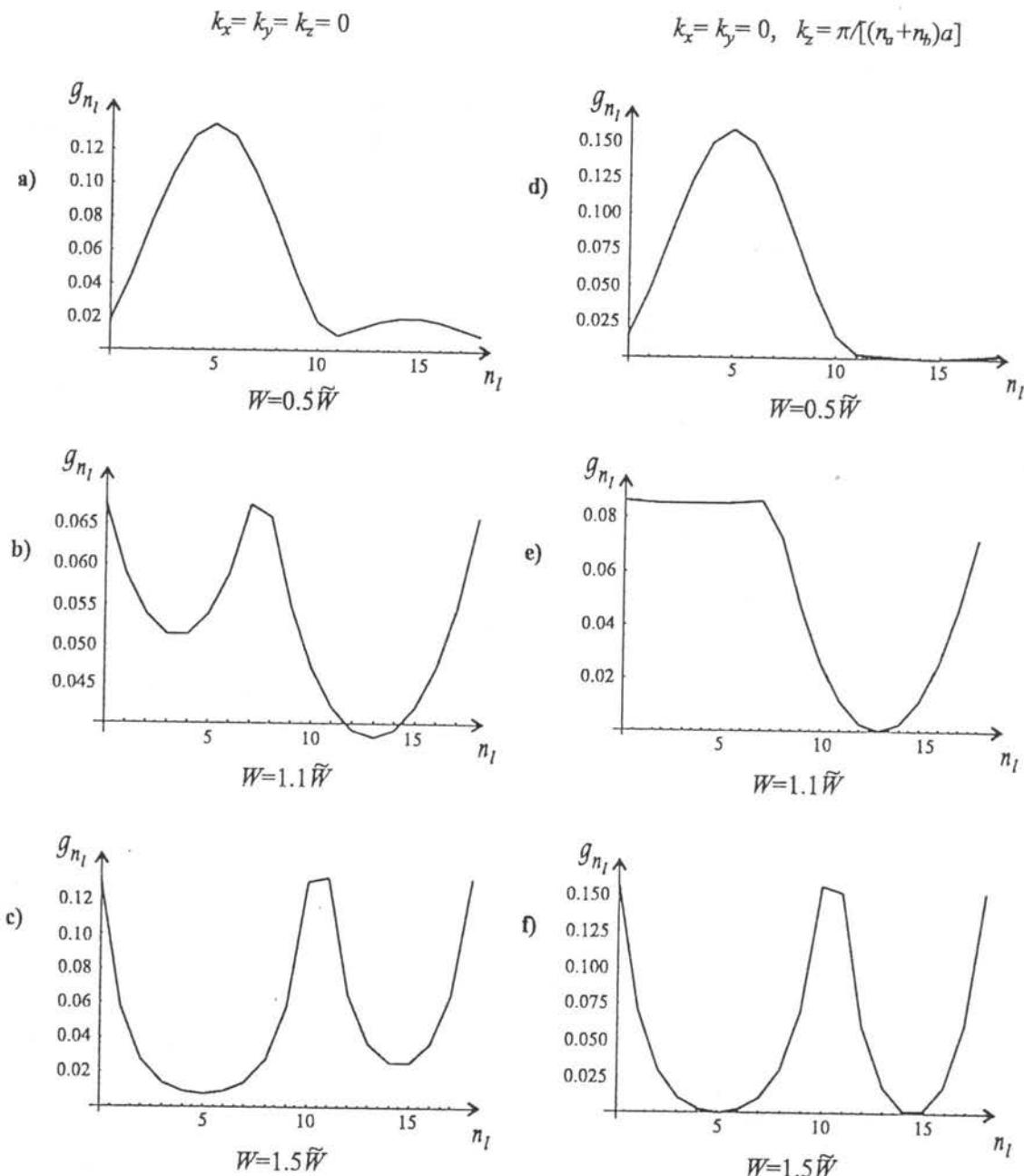
Pri tome su posebno analizirane superrešetke sa parnim brojem slojeva (slika 4.10a-f) a posebno sa neparnim brojem slojeva (slika 4.11a-f), jer je odnos broja slojeva pokazao bitan uticaj na zakon disperzije.

Na osnovu celokupne analize prostorne raspodele elektrona po slojevima superrešetke došlo se do sledećih zaključaka.

- Uočeno je da su neka od balkovskih stanja ravnomerno rasporedjena u oba filma (u većini slučajeva to su stanja sa srednjim energijama), dok se druga pojavljuju samo u jednom od filmova. Pri tome, elektronska stanja sa najnižim i najvišim energijama se isključivo javljaju samo u jednom filmu (slike 4.10a i 4.11a - centar I Briluenove zone i slike 4.10d i 4.11d - granica I Briluenove zone). Dakle, ovakav uprošćen model razmatran u aproksimaciji najbližih suseda, već samo pri promeni energetskog transfera izmedju filmova daje rezultate uočene od strane drugih autora [121,137]. Ovim se potvrđuje da primjenjeni metod izračunavanja može da se koristi za analizu kompleksnijih modela superrešetki.
- U slučaju kada je energetska transfer elektrona izmedju filmova slabiji od istog unutar filma ($W < \tilde{W}$), sa porastom interakcije W maksimumi verovatnijih stanja u okviru jednog filma se smanjuju, a povećavaju se stanja koja su pre tog bila manje verovatna, u okviru drugog filma. Pri tome su sva elektronska stanja balkovska (slike 4.10a,d i 4.11a,d), što je uočeno i prilikom prikaza zakona disperzije - sve disperzije grane leže unutar zone idealnog kristala.



Slika 4.10: Prostorna raspodela elektrona u superrešetki sa parnim brojem slojeva



Slika 4.11: Prostorna raspodela elektrona u superrešetki sa neparnim brojem slojeva

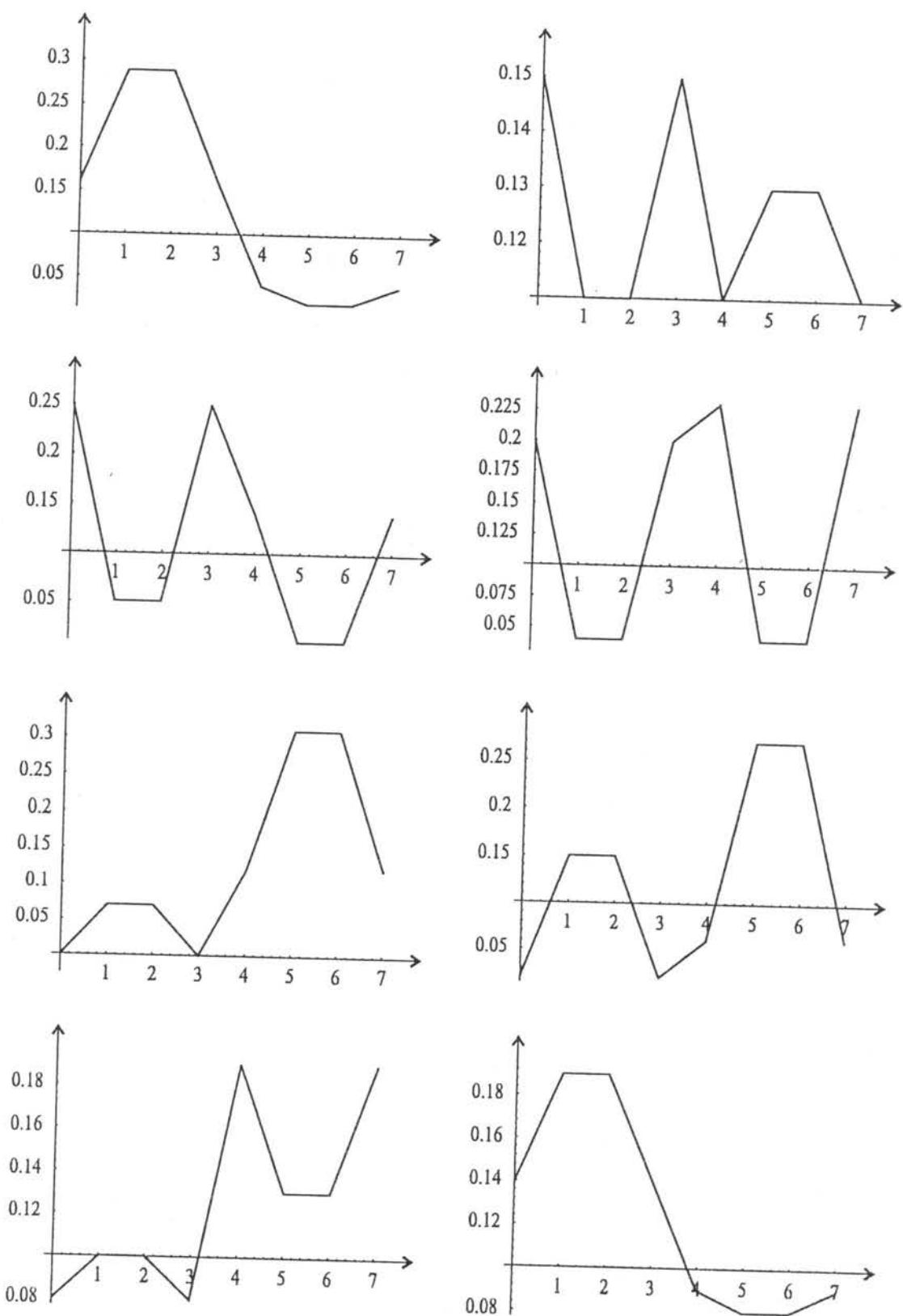
- Pri jačem elektronskom transferu između filmova ($W > \tilde{W}$) slika je obrnuta. Povećanjem interakcije W , manje verovatna stanja u okviru jednog filma se smanjuju, a verovatnija stanja u drugom filmu postaju izraženija. Na taj način dolazi do pojave lokalizovanih elektronskih stanja (slike 4.10b,c,f i 4.11b,c,f) čija je verovatnoća najveća na spoju dva filma i naglo opada ka njihovoj unutrašnjosti, pri čemu se broj tih stanja povećava sa porastom W . Analizom zakona dipserzije pokazano je da ta stanja izlaze van granica balkovske energetske zone [121,137].
- Kod superrešetke sa parnim brojem slojeva javlja se simetrija prostorne raspodele elektrona. Prostorna raspodela za niže energije ista je kao i odgovarajuća za više energije (potpuno su iste raspodele najniže (poslednje) i najviše (prve) energije, zatim pretposlednje i druge itd.). Tako će za ovu superrešetku (kod koje se javlja simetrija zakona disperzije u odnosu na pravu $\hbar\omega/\tilde{W} = 2$) uvek, pri $W > \tilde{W}$, za centar I Briluenove zone doći do pojave kako donjih (za najniže energije), tako i gornjih (za najviše energije) lokalizovanih stanja (slike 4.10 b,c,f). Na granici I Briluenove zone ova stanja će se pojaviti samo pri dovoljno velikoj interakciji W (npr. $W = 1.5\tilde{W}$), dok pri relativno maloj razlici između elektronskih transfera (npr. $W = 1.1\tilde{W}$, slika 4.10e) neće doći do pojave ovih stanja.
- Ukoliko je broj slojeva superrešetke neparan dolazi do pojave „ogledalske“ simetrije u odnosu na centar i granicu I Briluenove zone (raspodela za najniže energije u centru I Briluenove zone su iste kao i odgovarajuće raspodele za najviše energije na njenoj granici). Zbog toga će kod ove superrešetke, kod koje se javlja simetrija disperzionih krivih u odnosu na tačku: $k_z = \frac{\pi}{2\tilde{a}(n_a + n_b)}$, $\frac{\hbar\omega}{\tilde{W}} = 2$, uvek, pri $W > \tilde{W}$ doći do pojave gornjih i/ili donjih lokalizovanih elektronskih stanja (slike 4.11b,c,f). Tako npr. pri $W = 1.1\tilde{W}$ na granici I Briluenove zone neće doći do pojave donjih lokalizovanih elektronskih stanja (slika 4.11e), ali će doći do pojave gornjeg lokalizovanog stanja, što je prikazano na slici 4.11b (tu je ustvari, prikazana prostorna raspodela elektrona za najnižu energiju u centru I Briluenove zone i najvišu na njenoj granici).

4.2.2 Spektralne težine $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ superrešetke

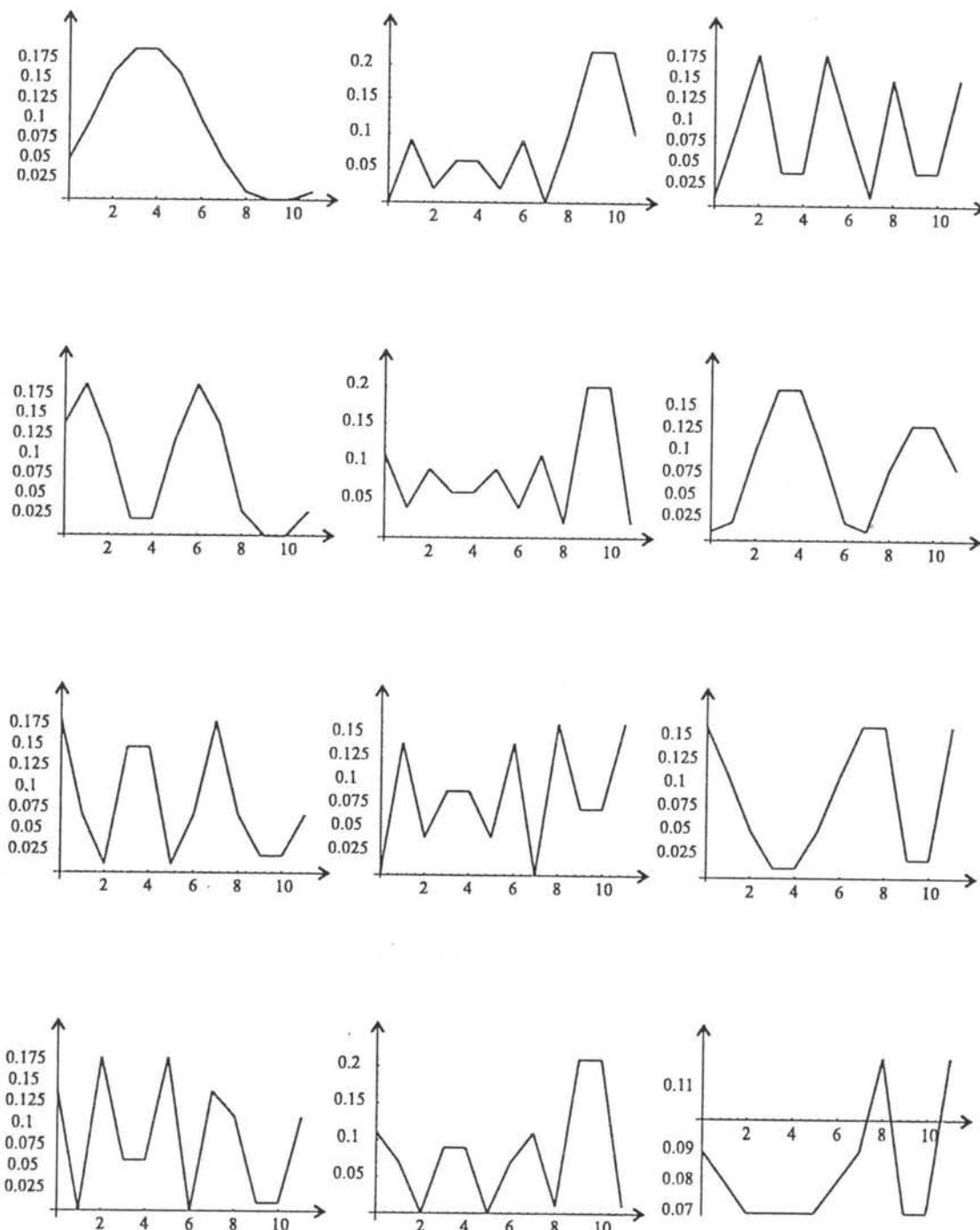
Kao i za prostu superrešetku, ovde su priimenjene numeričke metode nalaženja prostorne raspodele elektrona po slojevima ove superrešetke. U ovom slučaju, u jednačini (4.38) uzima se da je $\varrho = \hbar\omega$. Neki od analiziranih slučajeva prikazani su na slikama 4.12 i 4.13 (za oba slučaja prikazana je raspodela po svim energijama i to vertikalnim redosledom, počev od najniže). Na slici 4.12 predstavljena je superrešetka sa parametrima: $x = 0.25$, $p = -1$ i $n_a = n_b = 4$, dok superrešetka na slici 4.13 ima parametre: $x = 0.5$, $p = 1$ i $n_a = 8$, $n_b = 4$. Pri tome je na graficima tih slika prikazana zavisnost $g_{n_l} = g_{n_l}(n_l)$, odnosno na ordinatama se nalaze spektralne težine elektrona g_{n_l} , a na apscisama broj slojeva $n_l = n_a + n_b$.

Analizom prikazanih grafika došlo se do sledećih zaključaka.

- Ispitivanjem prostorne raspodele odmah se uočava da su stanja sa najnižim i najvišim energijama rasporedjena samo u jednom materijalu (kao kod proste superrešetke). Pri tome, stanja sa najnižim energijama (koja dogovaraju diskretnim stanjima u spektru) se javljaju isključivo u prvom materijalu (čime se potvrđuje da su to stanja kvantne jame), dok stanja sa najvišim energijama, u zavisnosti od x i p mogu preći i u drugi materijal (za $x > 0.5$ i $p > 1$). Verovatnoće nalaženja ovih stanja se smanjuju povećanjem broja slojeva. Takodje se uočava i pojava tipičnih zapreminskih stanja, koja su skoro ravnomerno rasporedjena u oba materijala.



Slika 4.12: Prostorna raspodela elektrona u $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ superrešetki:
 $x = 0.25$, $p = -1$, $n_a = n_b = 4$



Slika 4.13: Prostorna raspodela elektrona u $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ superrešetki:
 $x = 0.5$, $p = 1$, $n_a = 8$, $n_b = 4$

- Pojava lokalizovanih stanja uočena je na višim energetskim minizonama. Najveći uticaj na ova stanja ima parametar p . Kao što je rečeno, postoji neka kritična vrednost parametra koja dovodi do nultog zabranjenog gepa. Ta vrednost se nalazi u intervalu $-1 < p_c < 0$ ili $0 < p_c < 1$, u zavisnosti od broja slojeva i visine barijere. Naime, za vrednosti parametra ispod kritične, stanje koje se nalazilo na $n_a + n_b - 2$ disperzionaloj grani (ukupan broj je $n_a + n_b$) je bilo lokalizованo, a stanje $n_a + n_b - 1$ tipično zapreminske, da bi, za vrednost p_c došlo do zamene mesta ovih stanja. Na slici 4.12, gde je $p < p_c$, stanje $n_a + n_b - 2$ je lokalizованo, a na slici 4.13, gde je $p > p_c$, stanje $n_a + n_b - 1$ je lokalizованo. Ovaj parametar utiče i na zamenu drugih energetskih nivoa, što je ustvari dokaz da dolazi do inverzije minizona nakon spajanja disperzionalih grana [1].

Celokupnom analizom energetskih spektara i stanja u obe posmatrane superrešetke dolazi se do zaključka da se promenom karakterističnih parametara strukture može bitno uticati na njihove fizičke karakteristike.

Čak i samo promena debljine polaznih materijala utiče na promenu širine minizona i zabranjenih minizoni, ili pojavu nultih energetskih gepova u spektru [1,125]. U slučaju superrešetke $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$, promenom parametra x može se uticati na broj i raspored stanja kvantne jame²⁹. Pojava ovih stanja je uočena eksperimentalno na slojevitim strukturama, uopšte. Ova stanja doprinose magnetnom kuplovanju koje može dovesti do ogromne magnetootpornosti u ovim strukturama [127,141].

Promena energetskog transfera elektrona izmedju konstituenata (W ili p) utiče na pojavu lokalizovanih stanja, veoma bitnih u transportnim karakteristikama superrešetke [121,122,126, 128,137,138]. Ta stanja se mogu veoma jednostavno eksperimentalno izučavati raznim spektroskopskim tehnikama (medjuzonski prelazi izmedju ovih stanja pripadaju dosta većim energijama od ostalih prelaza u superrešetki) [142]. Takodje ona dovode do Šarkovog širenja i povećane apsorpcije, tako da postaju idealni kandidati za optičke modulatore i detektore.

Pored toga, medjelektronski transfer (W) utiče na transportne i transmisione karakteristike (naročito primenom električnog polja) superrešetke. U visokim električnim poljima, ukoliko se podesi da ovaj parametar bude mali (slab transfer izmedju elektrona), može doći do formiranja domena električnog polja (koje je još davno eksperimentalno utvrđeno - merenjem provodnosti). Tipičan dominantni proces tada je rezonantno tunelovanje izmedju različitih podzona (stanja) u jaimama koje pripadaju tim domenima [130,140]. Elektronski transfer proporcionalan je koeficijentu transmisije kroz superrešetku [129, 130,139]. Razumevanje transmisionih karakteristika superrešetke je značajno iz više razloga. Prisustvo minizona može se direktno potvrditi istraživanjem transmisije balističkih elektrona kroz superrešetku. Poznavanje transmisionih osobina veoma je važno kod njihove primene kao energetskih filtera. Na primer, u kvantnim kaskadnim laserima, filteri - superrešetke služe za selekciju populacije viših energetskih nivoa, aktivnog regiona.

Na bazi ovde opisanih modela i metoda moguće je istraživati još neke efekte i modele superrešetki, kakve su npr. aperiodične Fibonačijeve superešetke [143], sa nizom novih fizičkih osobina. Primjenjeni metod takodje dozvoljava proširenje modela uz uračunavanje uticaja raznih efekata (npr. električnog polja, deformaciju graničnih ili međupovršina i sl). To otvara vrata ka izučavanju mnogih novih uočenih efekata kod ovih struktura [129,130,139,140,143].

²⁹Negde ih još i nazivaju stanjima ispod barijere i ukazuju na njihovu ulogu kod ispitivanja kvantnih dimenzionih efekata [127,139].

4.3 Termodinamičke osobine superrešetki

Veliki interes za proučavanjem termodinamičkih osobina superrešetki pojavio se upravo zbog važnosti ovih osobina (toplote provodnosti) prilikom potencijalne primene u raznim uredjajima i aplikacijama. Sposobnost hladjenja čvrstog stanja materijala zahteva nisku topotnu provodnost [144]. Preliminarni eksperimentalni i teorijski radovi pokazuju da je topotna provodnost superrešetki prilično niska, kako za transport duž slojeva, tako i za transport normalan slojevima. Na termodinamičke osobine utiču fononi i elektroni. Mnoge teorije, koje koriste Boltzmanovu jednačinu, tretiraju eksitacije kao čestice i ignoriraju talasnu interferenciju. Sve one predviđaju da topotna provodnost normalna slojevima opada sa smanjenjem broja slojeva superrešetke. Najegzaktniji prilaz, koji koristi Boltzmanovu jednačinu, bi bio da se fononska stanja superrešetke tretiraju kao izvor rasejanja, ali još nije uradjen. S druge strane, pokazano je [144] da uzimanjem u obzir talasne interferencije, topotna provodnost u pravcu normalnom na slojeve raste sa smanjenjem broja slojeva.

U ovom delu biće analiziran elektronski udeo u termodinamičkim osobinama superrešetki u niskotemperaturskoj aproksimaciji (iz istih razloga kao u idealnim kristalima i tankim filmovima). Pri tome analizu ćemo ograničiti samo na prostu superrešetku.

4.3.1 Topotni kapacitet elektronskog podsistema

Za izračunavanje topotnog kapaciteta elektrona u superrešetki koristimo aproksimativni izraz za energiju elektrona (pošto nemamo analitičko rešenje). Kako je energetski spektar elektrona u superrešetki kvazikontinualan, to ga možemo aproksimirati sa balkovskim rezultatom u dugotalasnoj aproksimaciji, ali uvećanim za vrednost donjeg energetskog gema superrešetke:

$$E(\vec{k}) = Wa^2 k^2 + G_s, \quad G_s \approx \frac{2W}{n_a + n_b}, \quad (4.39)$$

gde je vrednost donjeg energetskog gema (G_s) procenjena na osnovu numeričkih rezultata (ovaj izraz važi jedino u slučaju simetrične superrešetke i to za slučaj kada je energetski transfer između filmova dva puta slabiji od transfera unutar njih). W predstavlja energetski transfer elektrona balaka.

Analizu započinjemo izrazom za unutrašnju energiju elektrona (2.66) sa prelazom sa sume na integral, slično kao kod balaka:

$$\sum_{\vec{k}} \rightarrow \frac{Na^3}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \sin \vartheta d\vartheta \int_0^{k_F} k^2 dk, \quad (4.40)$$

gde je $N \equiv N_x N_y N_z (n_a + n_b)$. Zamenom relacije za zakon disperzije (4.39) i prevodjenjem gornjeg integrala u integral po energiji, izraz za unutrašnju energiju (2.66) postaje:

$$U_s = \frac{N}{4\pi^2 W^{3/2}} \int_{G_s}^{E_F} \frac{E \sqrt{E - G_s}}{e^{(E - \mu_s)/\theta} + 1} dE. \quad (4.41)$$

Nakon smena: $E - G_s = Z^2$, $Z^2/\theta = \tau$ i $(\mu_s - G_s)/\theta = \eta$, dobija se:

$$U_s = \frac{N}{4\pi^2 W^{3/2}} \int_{G_s}^{(E_F - G_s)/\theta} \frac{(\theta\tau + G_s)\tau^{1/2}}{e^{\tau - \eta} + 1} d\tau. \quad (4.42)$$

U daljem izračunavanju gornju granicu integrala zameničemo sa $+\infty$, iz istog razloga kao što je učinjeno kod balka (radi se o niskim temperaturama, a G_s je malo u odnosu na E), pa nakon smene $\tau - \eta = \xi$ sledi:

$$U_s = \frac{N\theta^{3/2}}{4\pi^2 W^{3/2}} \left[\theta \int_{-\eta}^{\infty} \frac{(\xi + \eta)^{3/2}}{e^\xi + 1} d\xi + G_s \int_{-\eta}^{\infty} \frac{(\xi + \eta)^{1/2}}{e^\xi + 1} d\xi \right]. \quad (4.43)$$

Za izračunavanje ovih integrala primenjuju se iste aproksimacije kao kod idealnih kristala, nakon čega sledi:

$$U_s = \frac{N(\mu_s - G_s)^{3/2}}{6\pi^2 W^{3/2}} \left\{ \frac{3}{5}(\mu_s - G_s) \left[1 + \frac{5\pi^2}{8} \left(\frac{\theta}{\mu_s - G_s} \right)^2 \right] + G_s \left[1 + \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{\theta}{\mu_s - G_s} \right)^2 \right] \right\}. \quad (4.44)$$

Za nalaženje zavisnosti hemijskog potencijala μ_s od temperature, izraz (2.70) možemo napisati u obliku:

$$N = \frac{2}{3} \left(\frac{\partial U_s}{\partial (\mu_s - G_s)} \right)_\theta.$$

Na taj način se dobija:

$$6\pi^2 W^{3/2} = (\mu_s - G_s)^{3/2} \left[1 + \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{\theta}{\mu_s - G_s} \right)^2 \right] + G_s (\mu_s - G_s)^{1/2} \left[1 + \frac{\pi^2}{24} \left(\frac{\theta}{\mu_s - G_s} \right)^2 \right], \quad (4.45)$$

odakle, tražeći limes $\theta \rightarrow 0$ sledi:

$$6\pi^2 W^{3/2} = (\mu_s - G_s)^{3/2} - G_s (\mu_s - G_s)^{1/2}.$$

Uvodeći smenu $(\mu_s - G_s)^{1/2} = q$ dobija se kubna jednačina (po q) čijim se rešavanjem [106] dobija vrednost hemijskog potencijala superrešetke na temperaturi $T = 0$ K:

$$\mu_{s0} = (6\pi^2 W^{3/2})^{2/3} + \frac{G_s}{3} = \mu_{b0} + \frac{G_s}{3}, \quad (4.46)$$

gde je μ_{b0} hemijski potencijal u balku na $T = 0$ K. Zamenom (4.46) u (4.45) dobija se zavisnost hemijskog potencijala superrešetke od temperature:

$$\mu_s(\theta) = G_s + \left(\mu_{s0} - \frac{G_s}{3} \right) \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{\theta}{\mu_s - G_s} \right)^2 \right], \quad (4.47)$$

odakle, zamenom u (4.44), sledi izraz za unutrašnju energiju elektrona superrešetke:

$$U_s = \frac{3N}{5} \left(\mu_{s0} - \frac{G_s}{3} \right) \left[1 + \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{\theta}{\mu_s - G_s} \right)^2 \right] + NG_s \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{\theta}{\mu_s - G_s} \right)^2 \right]. \quad (4.48)$$

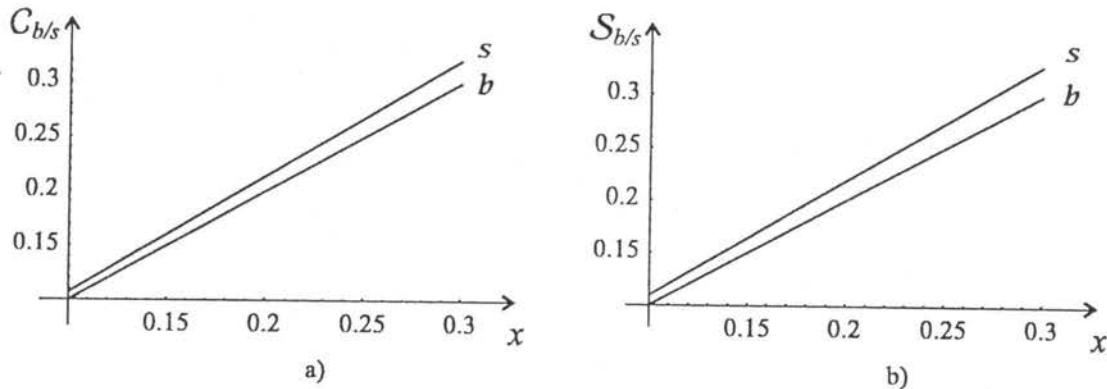
Primenom definicije (2.73.) izraz za elektronski ideo u topotnom kapacitetu superrešetke postaje:

$$C_s = \frac{k_B \pi^2}{2} \frac{\mu_{s0} - \frac{2}{3} G_s}{(\mu_{s0} - G_s)^2} \theta. \quad (4.49)$$

Da bi smo uporedili ovaj izraz sa odgovarajućim (2.74) u balku, uvodimo sledeće označbe: $x = \theta/\mu_{b0}$ i $C_0 = k_B \pi^2 / 2$, te je:

$$C_b \equiv \frac{C_b}{C_0} = x; \quad C_s \equiv \frac{C_s}{C_0} = \frac{1 - \frac{G_s}{3\mu_{b0}}}{1 - \frac{2G_s}{3\mu_{b0}}} x = \frac{1 - \frac{2}{3(6\pi^2)^{2/3}(n_a + n_b)}}{1 - \frac{4}{3(6\pi^2)^{2/3}(n_a + n_b)}} x. \quad (4.50)$$

Na slici 4.14a grafički je predstavljena zavisnost toplotnog kapaciteta elektrona od temperature u oba posmatrana sistema (superrešetka - kriva s i balk - kriva b). Zavisnost toplotnog kapaciteta superrešetke od temperature je, kao i kod balka, linearna, ali je vrednost toplotnog kapaciteta veća u superrešetki. Ta razlika je izraženija na niskim temperaturama, dok pri $x \rightarrow 1$ praktično iščezava. Pored toga povećanjem broja slojeva superrešetke toplotni kapacitet se smanjuje i približava balkovskoj vrdenosti. Dakle, povećanjem broja slojeva superrešetke smanjuje se njena toplotna provodnost. Pokazano je da isto važi i za fononski ideo u toplotnom kapacitetu superrešetke [144].



Slika 4.14: Temperaturska zavisnost toplotnog kapaciteta (a) i entropije (b) elektrona

4.3.2 Elektronski ideo u entropiji

Isti postupak kao u prethodnom slučaju primenićemo za izračunavanje entropije elektrona u superrešetkama. Polazeći od izraza za slobodnu energiju elektronskog gasa (2.75) i uvođenjem smena iz prethodnog izračunavanja, slobodna energija elektrona u superrešetkama dobija oblik:

$$F_s = -\frac{\theta^{5/2} N}{4\pi^2 W^{3/2}} \int_{-\eta}^{\infty} (\xi + \eta)^{1/2} \ln(1 + e^{-\xi}) d\xi. \quad (4.51)$$

Nakon višestruke parcijalne integracije i aproksimacija primenjenih kod istog izračunavanja za idealne kristale i film-strukture, ovaj izraz postaje:

$$F_s = -\frac{N}{10\pi^2 W^{3/2}} (\mu_s - G_s)^{5/2} \left[1 + \frac{5\pi^2}{8} \left(\frac{\theta}{\mu_s - G_s} \right)^2 \right]. \quad (4.52)$$

Zamenom izraza (4.47) u prethodni izraz, dobija se:

$$F_s = -\frac{N}{15\pi^2 W^{3/2}} \left(\mu_{s0} - \frac{G_s}{3} \right)^{5/2} \left[1 + \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{\theta}{\mu_{s0} - G_s} \right)^2 \right]. \quad (4.53)$$

Primenom definicije (2.78), dobija se izraz za elektronski ideo u entropiji superrešetke:

$$S_s = \frac{k_B \pi^2}{2} \frac{\mu_{s0} - \frac{1}{3} G_s}{(\mu_{s0} - G_s)^2} \theta, \quad (4.54)$$

odakle se uočava njena linearna temperaturska zavisnost kao i u balku.

Da bi smo grafički predstavili i uporedili entropiju superrešetke sa balkovskim rezultatom uvodimo oznake $S_0 = k_B \pi^2/2$ i $x = \theta/\mu_{b0}$. Na taj način, korišćenjem izraza (2.79), (4.54) i (4.39) sledi:

$$S_b \equiv \frac{S_b}{S_0} = x; \quad S_s \equiv \frac{S_s}{S_0} = \frac{1}{1 - \frac{2G_s}{3\mu_{b0}}} x = \frac{\frac{1}{4}}{1 - \frac{1}{3(6\pi^2)^{2/3}(n_a + n_b)}} x. \quad (4.55)$$

Ova zavisnost predstavljena je na slici 4.14b. (kriva b - balk, kriva s - superrešetka), odakle se vidi da entropija u superrešetkama ima veću vrednost od balkovske. Povećanjem broja slojeva superrešetke entropija se smanjuje i teži balkovskoj vrednosti.

Ovi rezultati, dobijeni u veoma gruboj aproksimaciji, ipak pokazuju odstupanje u odnosu na odgovarajuće balkovske, koje se javlja zbog prisustva energetskog gepa u superrešetkama. Povećanjem energetskog gepa (smanjenjem debljine superslojeva) povećava se toplotna provodnost superrešetke. Međutim, ovakav zaključak ne treba uzeti kao definitivan jer je pokazano [144] da, u zavisnosti od srednjeg slobodnog puta nosilaca nanelektrisanja u odnosu na debljinu supersloja, dolazi do pojave miniuma toplotne provodnosti (nakon čega ponovo raste i pri dovoljno velikoj debljini dostiže saturaciju).

5 Zaključak

Analizom energetskih spektara i stanja u slojevitim kristalnim stukturama (tanki filmovi i superrešetke) došlo se do važnijih zaključaka koji ukazuju na potvrdu već postignutih rezultata i tumačenja sasvim novih efekata i pojava.

1. Ove analize pokazuju bitne razlike u zakonu disperzije tankih filmova (analiziran je zakon disperzije kako tankog filma sa primitivnom kubnom rešetkom, tako i filma sa dve podrešetke) u odnosu na isti kod masivnih kristala.
 - Za razliku od kontinualne energetske zone beskonačnog kristala zona dozvoljenih elektronskih energija u filmu je izrazito diskretna i uža. U filmu sa podrešetkom ova zona se cepta na dve podzone, diskretnih energetskih stanja, medjusobno razdvojenih zabranjenom zonom (u odgovarajućem beskonačnom kristalu takodje egzistiraju dve podzone, ali kontinualne). Diskretizacija komponente talasnog vektora javlja se u pravcu duž koga je sistem ograničen. Broj diskretnih stanja je kod filma primitivne kubne strukture jednak broju slojeva, dok je kod filma sa podrešetkom dvostruko veći. Povećanjem broja slojeva filma povećava se broj stanja unutar zone dozvoljenih energija, kao i sama širina ove zone.
 - Poredjenjem beskonačnih i film-struktura uočava se osnovna razlika koja se javlja kao isključiva posledica ograničenosti filmova, a to je postojanje energetskih gepova. Veličine gepova veoma brzo opadaju sa povećanjem debljine filma, što znači da egzistiraju samo u ultratankim strukturama. Usled postojanja gepova zabranjena zona filma sa podrešetkom je šira u odnosu na istu kod idealnih kristala. Prisustvo i veličine gepova utiču na izmenu osnovnog stanja filma i položaj Fermijevog nivoa, a samim tim i na fizičke osobine ovih struktura.
 - Promena perturbacionih parametara na/u površinskim slojevima filma bitno utiče na njihove elektronske osobine. Povećanjem energije elektrona na graničnim površinama (parametri $\epsilon_{1/2}$) dolazi do pomeranja celog spektra ka višim vrednostima energija, dok se povećanjem energije elektronskog transfera između graničnih i njima susednih slojeva (parametri $w_{1/2}$) zona dozvoljenih elektronskih energija u filmu širi prema granicama balkovske energetske zone. Na taj način, pogodnim izborom parametara može se postići da neka od energetskih stanja izadju van najviše i/ili najniže granice idealnog kristala. Tada dolazi do pojave lokalizovanih stanja, čija je egzistencija potvrđena analizom prostorne raspodele. Pokazano je da energije ovih stanja zavise kako od perturbacionih parametara tako i od debljine filma. Povećanjem debljine filma teže jednoj konačnoj vrednosti.
 - Pored toga, kod filma sa podrešetkom ova stanja se mogu naći u zabranjenoj zoni, dovodeći do njenog sužavanja. Uticaj parametara na širinu zabranjene zone je takav da, kad se smanjuje parametar ϵ , dolazi do povećanja širine ove zone. Zabranjena zona ima maksimalnu širinu ukoliko ne postoji perturbacija na čvorovima površinskih slojeva ($\epsilon = 0$).
2. Numeričke analize elektronskih energetskih stanja u superešetkama (prostim i poluprovodničkim - $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$) pokazuju bitan uticaj energetskih i drugih parametara ovih struktura.
 - Kao posledica narušenja translacione invarijantnosti duž z -pravca dolazi do cepanja kontinualne energetske zone na niz podzona medjusobno razdvojenih zabranjenim

zonama. Pri tome su, kod proste superrešetke, sve minizone takodje kontinualne, dok se kod poluprovodničke, pored kontinualnih (rasporedjenih na višim energijama), javljaju i diskretni energetski nivoi, na nižim energijama. Analizom prostorne raspodele pokazuje se da su to diskretna stanja kvantne jame.

- Širina minizona i medjusobni raspored disperzionih grana zavise od broja slojeva (debljine) superrešetki. U nekim slučajevima dolazi do spajanja disperzionih grana u centru ili na granici I Briluenove zone, odnosno do pojave nulte zabranjene zone.
- Promena energije elektronskog transfera izmedju filmova, kod proste superrešetke, dovodi do pojave energetskih gepova (ceo disperzionalni spektar nalazi se unutar balkovskih granica) ili lokalizovanih stanja (stanja koja izlaze van balkovske zone). Prostorna raspodela pokazuje da, ukoliko je taj transfer jači dolazi do pojave većeg broja lokalizovanih stanja. Kod poluprovodničke superrešetke ovaj transfer utiče na inverziju kako energetskih nivoa sa lokalizovanim stanjima, tako i svih ostalih.
- Povećanjem molskog udela x (visine barijere) kod poluprovodničke superrešetke, dolazi do porasta broja diskretnih stanja, ali i sužavanja minizona. Pri tome dolazi do širenja spektra ka višim energijama, pa neke kontinualne grane izlaze van gornje granice balkovske zone prvog materijala.

Izmenjenost zakona disperzije i energetskih stanja elementarnih nosilaca nanelektrisanja u slojevitim kristalima uzrokuje izmenjeno termodinamičko ponašanje ovih sistema. Rezultati sprovedene teorijske analize pokazuju sledeće zakonitosti.

1. Na osnovu analitičkog rešenja zakona disperzije u film-strukturama sa primitivnom kubnom rešetkom, ispitane su njihove termodinamičke osobine i uporedjene sa istim u idealnim kristalima.
 - Elektronski ideo u topotnoj kapacitetu film-struktura ima istu (linearnu) zavisnost od temperature, ali sa smanjenim koeficijentom nagiba, odnosno niži (na istim temperaturama) je u odnosu na masivne uzorke. Povećanjem energetskog gepa filma (pogodnjim izborom parametara ili smanjenjem debljine) vrednost topotnog kapaciteta se smanjuje.
 - ideo nanelektrisanja u entropiji tankih filmova pokazuje takodje linearu temperatursku zavisnost, kakva je kod masivnih uzoraka. Više vrednosti koeficijenta nagiba ukazuju da su film-strukture neuredjeniji termodinamički sistemi od neograničenih, ali i bliži ravnotežnom stanju. Povećanjem energetskog gepa entropija još više raste.
 - Takvo temperatursko ponašanje filmova vodi indirektno do zaključka da su oni bolji superprovodni materijali.
2. Za superrešetku je termodinamička analiza vršena tako što je zakon disperzije procenjen na osnovu numeričkih proračuna.
 - Topotni kapacitet u superrešetskama linearno zavisi od temperature, ali ima veću vrednost u odnosu na balkovski uzorak. Pri tome, povećanjem broja slojeva teži balkovskoj vrednosti, odnosno topotna provodnost se smanjuje.
 - Na isti način ponaša se i entropija elektrona u superrešetskama, s tim što pokazuje nešto viši koeficijent nagiba u odnosu na topotni kapacitet.

Celokupna analiza slojevitih kristalnih struktura pokazala je da bitan uticaj na fizičke karakteristike ovih sistema ima narušenje translacione simetrije. Promenom parametara strukture (energetskih parametara, graničnih uslova ili njihovih dimenzija) može se uticati na poboljšanje fizičkih osobina (transportnih, topotnih, optičkih, ...) koje imaju značaja prilikom primene ovih struktura u raznim uredajima. Teorijski metod primenjen prilikom ove analize otvara mogućnosti za nova istraživanja - kako za opisivanje raznih efekata kod ovde opisanih slojevitih struktura, tako i za analizu drugih nanostruktura.

6 Dodatak: Grinove funkcije i Čebiševljevi polinomi

Grinove funkcije su definisane u kvantnoj teoriji polja i, uglavnom, „barataju” sa kontinualnim promenljivima. Njihova primena na fiziku čvrstog stanja omogućena je translatornom invarijantnošću datog kristalnog uzorka. U ovoj disertaciji je pokazana mogućnost njihove primene i na ograničene - translaciono neinvarijantne kristalne strukture.

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 na ograničene sisteme.

6.1 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 [33-39,51].

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

$$\langle \hat{A}(x, t) \rangle_t = \text{Sp} \langle \hat{A}(x, t) \hat{\rho}_t \rangle, \quad (6.1)$$

gde je:

$$\hat{\rho}_t = e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{S}(t, t_0) e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \quad (6.2)$$

neravnotežni statistički operator, a $\hat{\rho}_0$ - ravnotežni statistički operator³⁰. Ako se (6.1) zameni u (6.2) i izvrše dve ciklične permutacije operatora [24,33], dobija se:

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

tj.

$$\langle \hat{A}(x, t) \rangle_t = \langle \hat{S}^{-1}(t, t_0) \hat{A}(x, t) \hat{S}(t, t_0) \rangle_0, \quad (6.3)$$

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:

$$\hat{S}(t, t_0) = \hat{T} \exp \left[\frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{W}(t') \right]. \quad (6.4)$$

³⁰Za 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).

Ako se \hat{S} -matrica razvije u red i zadrži na prva dva člana, što odgovara linearnej 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

$$\langle \hat{A}(x, t) \rangle_t = \langle \hat{A}(x, t) \rangle_0 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \langle \hat{A}(x, t) \hat{T} \hat{W}(t') - \hat{T} \hat{W}(t') \hat{A}(x, t) \rangle_0 . \quad (6.5)$$

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 (6.5) prelazi u:

$$\langle \hat{A}(x, t) \rangle_t = \langle \hat{A}(x, t) \rangle_0 + L(t, t_0) , \quad (6.6)$$

gde je:

$$L(t, t_0) = \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \Theta(t - t') \langle \hat{A}(x, t) \hat{W}(t') - \hat{W}(t') \hat{A}(x, t) \rangle_0 \quad (6.7)$$

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

Radi dalje analize linearног odziva potrebno je izvršiti konkretizaciju $\hat{W}(t)$. Jedna od opštijih formi hamiltonijana spoljašnje perturbacije je [33-36]:

$$\hat{H}_{int}(t') = \int dx' \hat{B}(x', t') \varepsilon(x', t') , \quad (6.8)$$

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:

$$\hat{W}(t) = \exp \left(-\frac{H_0 t}{i\hbar} \right) \hat{H}_{int}(t) \exp \left(\frac{H_0 t}{i\hbar} \right) , \quad (6.9)$$

na osnovu (6.8) i (6.9) operator $W(t')$ će biti:

$$\hat{W}(t') = \int dx' \hat{B}(x', t') \varepsilon(x', t') , \quad (6.10)$$

gde je

$$\hat{B}(x', t') = \exp \left(-\frac{H_0 t}{i\hbar} \right) \hat{B}(x', t') \exp \left(\frac{H_0 t}{i\hbar} \right) \quad (6.11)$$

Šredingerov operator napisan u reprezentaciji interakcije. Zamenom (6.10) u (6.7) dobija se:

$$L(t, t_0) = \frac{1}{i\hbar} \int dx' \int_{t_0}^t dt' \varepsilon(x', t') G(x, x'; t, t') , \quad (6.12)$$

gde je veličina:

$$G(x, x'; t, t') \equiv \Theta(t - t') \langle \hat{A}(x, t) \hat{B}(x', t') - \hat{B}(x', t') \hat{A}(x, t) \rangle_0 \quad (6.13)$$

i naziva se dvovremenska temperaturska retardovana funkcija Grina. Ona zavisi od $6N + 2$ promenljivih (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 eksplisitno 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 (6.13) prelazi u:

$$\begin{aligned} G(x, x'; t, t') &\longrightarrow G(x - x', t - t') = \\ &= \Theta(t - t') [\mathcal{J}_{AB}(x - x', t - t') - \mathcal{J}_{BA}(x - x', t - t')] . \end{aligned} \quad (6.14)$$

Ovde su uvedene korelacione funkcije:

$$\mathcal{J}_{AB}(x - x', t - t') = \langle \hat{A}(x, t) \hat{B}(x', t') \rangle_0 ; \quad \mathcal{J}_{BA}(x - x', t - t') = \langle \hat{B}(x', t') \hat{A}(x, t) \rangle_0 \quad (6.15)$$

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 [21-23,33].

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:

$$G_{\vec{n}\vec{m}}(t) \equiv \langle \langle \hat{A}_{\vec{n}}(t) \mid \hat{B}_{\vec{m}}(0) \rangle \rangle = \Theta(t) \langle [\hat{A}_{\vec{n}}(t), \hat{B}_{\vec{m}}(0)] \rangle_0 . \quad (6.16)$$

Za najrasprostranjeniji način izračunavanja korelacionih funkcija, pa prema tome i svih relevantnih karakteristika sistema, smatra se metod jednačina kretanja za Grinove funkcije [33-36]:

$$\frac{d}{dt} G_{\vec{n}\vec{m}}(t) = \frac{d}{dt} \Theta(t) \langle [\hat{A}_{\vec{n}}(t), \hat{B}_{\vec{m}}(0)] \rangle_0 + \Theta(t) \langle \left[\frac{d\hat{A}_{\vec{n}}(t)}{dt}, \hat{B}_{\vec{m}}(0) \right] \rangle_0 . \quad (6.17)$$

Korišćenjem Hajzenbergovih jednačina kretanja za operatore fizičkih veličina:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{A}(t) = [\hat{A}_{\vec{n}}(t), \hat{H}(t)]$$

i osnovnih definicija

$$\frac{d}{dt} \Theta(t) = \delta(t) , \quad [\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} ,$$

ovaj izraz se svodi na:

$$i\hbar \frac{d}{dt} G_{\vec{n}\vec{m}}(t) = i\hbar \delta(t) C_{\vec{n}\vec{m}} + \langle \langle [\hat{A}_{\vec{n}}(t), H(t)] \mid \hat{B}_{\vec{m}}(0) \rangle \rangle , \quad (6.18)$$

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:

$$G_{\vec{n}\vec{m}}(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega t} G_{\vec{n}\vec{m}}(\omega) \quad (6.19)$$

jednačina (6.18) prelazi u

$$\hbar\omega G_{\vec{n}\vec{m}}(\omega) = \frac{i\hbar}{2\pi} C_{\vec{n}\vec{m}} + \langle\langle [\hat{A}_{\vec{n}}(t), H(t)] \mid \hat{B}_{\vec{m}}(0)\rangle\rangle_{\omega}. \quad (6.20)$$

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 određivanje Grinove funkcije [34,35]. Da bi se i izračunala tražena jednočestična, a redje dvočestična Grinova funkcija, mora se ovaj beskonačan red negde prekinuti korišćenjem neke dovoljno opravdane aproksimacije [33].

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 ekscitacija [34,38,39].

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 [34,35]:

$$\lim_{\delta \rightarrow +0} [G_{\vec{n}\vec{m}}(\omega + i\delta) - G_{\vec{n}\vec{m}}(\omega - i\delta)] = \left(e^{\hbar\omega/\theta} - 1 \right) \mathcal{J}_{BA}^{\vec{n}\vec{m}}(\omega), \quad (6.21)$$

gde je $\mathcal{J}_{BA}^{\vec{n}\vec{m}}(\omega)$ Furijeov transform korelaceone funkcije $\mathcal{J}_{BA}^{\vec{n}\vec{m}}(t)$. Za $t = 0$ korelaceone funkcije (6.15) predstavljaju srednje vrednosti proizvoda odgovarajućih operatora.

U ovom radu je pokazano da se metod Grinovih funkcija može uspešno primeniti i na sisteme sa narušenom translacionom simetrijom. Pored opisanih struktura, ovaj metod se pokazao kao veoma pogodan za nalaženje zakona disperzije elementarnih ekscitacija (elektrona i fonona) u drugim niskodimenzionim sistemima (kvantne žice, kvantne tačke i nanotube) [145-151]. Pri tome, za kvantne žice (koje predstavljaju kristalne strukture ograničene u dva kristolograf-ska pravca) i kvantne tačke (sistemi ograničeni u sva tri pravca) moguće je, korišćenjem ovog metoda, naći analitički oblik zakona disperzije u slučaju kada ne postoje perturbacije na i izmedju površinskih slojeva [145,148,151].

6.2 Karakteristični polinomi Čebiševa

Ovde ćemo detaljno analizirati karakteristične determinante oblika:

$$\mathcal{P}_n(x) = \begin{vmatrix} x & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & x & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & x & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \ddots & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & x & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & x & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & x \end{vmatrix}_n \quad (6.22)$$

koje odgovaraju različitim vrednostima $n = 0, 1, 2, \dots, N$. Polazeći od (6.22), uz prepostavljene početne uslove:

$$\mathcal{P}_0(x) = 1; \quad \mathcal{P}_1(x) = x, \quad (6.23)$$

može se pokazati da determinante $\mathcal{P}_n(x)$ zadovoljavaju sledeću rekurentnu relaciju [50]:

$$\mathcal{P}_{n+1}(x) = x\mathcal{P}_n(x) - \mathcal{P}_{n-1}(x). \quad (6.24)$$

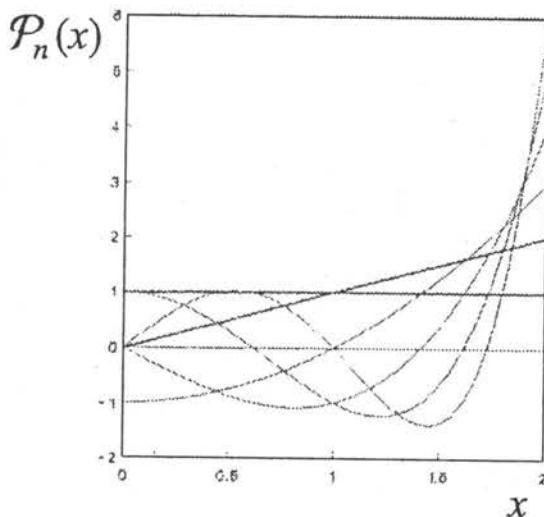
Sličnu relaciju zadovoljavaju i Čebiševljevi polinomi prve i druge vrste [49]:

$$\mathcal{C}_{n+1}(x) = 2x\mathcal{C}_n(x) - \mathcal{C}_{n-1}(x),$$

uz početne uslove $\{\mathcal{C}_0(x) = 1, \mathcal{C}_1(x) = x\}$ i $\{\mathcal{C}_0(x) = 0, \mathcal{C}_1(x) = \sqrt{1-x^2}\}$, respektivno.

Rekurentne relacije (6.24) i početni uslovi (6.23) mogu poslužiti za obrazovanje polinoma $\mathcal{P}_n(x)$. Navodimo prvih deset koji se koriste u većini proračuna. Neki od ovih polinoma prikazani su na slici 6.1.

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_0(x) &= 1 \\ \mathcal{P}_1(x) &= x \\ \mathcal{P}_2(x) &= x^2 - 1 \\ \mathcal{P}_3(x) &= x^3 - 2x \\ \mathcal{P}_4(x) &= x^4 - 3x^2 + 1 \\ \mathcal{P}_5(x) &= x^5 - 4x^3 + 3x \\ \mathcal{P}_6(x) &= x^6 - 5x^4 + 6x^2 - 1 \\ \mathcal{P}_7(x) &= x^7 - 6x^5 + 10x^3 - 4x \\ \mathcal{P}_8(x) &= x^8 - 7x^6 + 15x^4 - 10x^2 \\ \mathcal{P}_9(x) &= x^9 - 8x^7 + 21x^5 - 20x^3 + 5x \\ \mathcal{P}_{10}(x) &= x^{10} - 9x^8 + 28x^6 - 35x^4 + 15x^2 - 1 \end{aligned} \quad (6.25)$$



Slika 6.1: Polinomi tipa čebiševa za $n = 0, 1, 2, \dots, N$

Da bi našli opšti oblik polinoma $\mathcal{P}_n(x)$, treba uočiti da rekurentna relacija (6.24) predstavlja homogenu diferencnu jednačinu drugog reda sa konstantnim koeficijentima za svako x . Rešenja takvih jednačina su oblika [49]:

$$\mathcal{P}_n(x) = r^n, \quad (6.26)$$

gde je r pogodno odabrana konstanta različita od nule. Zamenom probnog rešenja (6.26) u (6.24), dobija se karakteristična jednačina diferencne jednačine,

$$r^2 - xr + 1 = 0 \quad (6.27)$$

čiji su korenii:

$$r_{1/2} = \frac{1}{2} \left(x \pm \sqrt{x^2 - 4} \right) . \quad (6.28)$$

U zavisnosti od varijable x mogu se razlikovati tri slučaja.

a) Za $x > 2$, korenii (6.28) su realni, pa je opšte rešenje jednačine (6.24) oblika:

$$\mathcal{P}_n(x) = Ar_1^n + Br_2^n , \quad (6.29)$$

gde su A i B proizvoljne konstante koje se mogu odrediti iz početnih uslova (6.23):

$$A = \frac{x - r_2}{r_1 - r_2} ; \quad B = \frac{r_1 - x}{r_1 - r_2} . \quad (6.30)$$

Na taj način rešenje (6.29) postaje:

$$\mathcal{P}_n(x) = \frac{2^{-(n+1)}}{\sqrt{x^2 - 4}} \left[(x + \sqrt{x^2 - 4})^{n+1} - (x - \sqrt{x^2 - 4})^{n+1} \right] , \quad x > 2 ; . \quad (6.31)$$

b) Za $x = 2$ korenii karakteristične jednačine su realni i jednaki ($r_1 = r_2 = 1$), pa je opšte rešenje oblika:

$$\mathcal{P}_n(x) = Ar_1^n + Bnr_2^n . \quad (6.32)$$

Iz početnih uslova se dobija: $A = B = 1$, tako da je:

$$\mathcal{P}_n(x) = 1 + n ; \quad x = 2 . \quad (6.33)$$

c) Ako je $x \in (-2, 2)$, pojavljuju se kompleksni korenii:

$$r_{1/2} = \frac{1}{2} \left(x \pm i\sqrt{x^2 - 4} \right) , \quad (6.34)$$

koji se mogu napisati u obliku:

$$r_{1/2} = \cos \vartheta \pm i \sin \vartheta , \quad (6.35)$$

gde je

$$x = 2 \cos \vartheta . \quad (6.36)$$

Rešenje diferencne jednačine, i u ovom slučaju ima oblik (6.29), pri čemu su:

$$A = \frac{\cos \vartheta + i \sin \vartheta}{2i \sin \vartheta} ; \quad B = -\frac{\cos \vartheta - i \sin \vartheta}{2i \sin \vartheta} . \quad (6.37)$$

Uvrštavajući (6.36) u (6.29), nakon kraćeg sredjivanja uz pomoć Moavrovog obrasca, dobijamo:

$$\mathcal{P}_n(x) \rightarrow \mathcal{P}_n(\vartheta) = \frac{\sin(n+1)\vartheta}{\sin \vartheta} ; \quad x \in (-2, 2) . \quad (6.38)$$

Nule Čebiševljevih polinoma, koje slede iz uslova: $\mathcal{P}_n(\vartheta) \equiv 0$ (pri $\vartheta \neq 0$) definisane su relacijom

$$\vartheta_\nu = \frac{\pi}{n+1} \nu ; \quad \nu = 1, 2, 3, \dots, n$$

i imaju posebnog fizičkog značaja jer definišu polove (singularitete) Grinovih funkcija, a oni, sa svoje strane, energije elementarnih ekscitacija i vreme njihovog života [33]. Na taj način je i omogućeno analitičko odredjivanje energija elementarnih ekscitacija kod tzv „idealnih“ filmova.

Eksplicitni oblik (6.38) polinoma $\mathcal{P}_n(x)$ omogućava da se dokaže njihova ortogonalnost. Pazeći od poznate formule:

$$\int_0^\pi \sin[(n+1)\vartheta] \sin[(m+1)\vartheta] d\vartheta = \frac{\pi}{2} \delta_{nm},$$

smenom, $\vartheta = \arccos(x/2)$, dobijamo:

$$\int_{-2}^2 \frac{1}{4} \sqrt{4-x^2} \mathcal{P}_n(x) \mathcal{P}_m(x) dx = \frac{\pi}{2} \delta_{nm}. \quad (6.39)$$

Poslednja relacija pokazuje da su polinomi $\mathcal{P}_n(x)$, $n = 0, 1, 2, \dots$ ortogonalni u intervalu $(-2, 2)$ sa težinom $\sqrt{4-x^2}/4$.

Pored toga, ako relaciju (6.38) napišemo u obliku:

$$\mathcal{P}_n(x) = \frac{\sin[(n+1)\arccos(x/2)]}{\sqrt{1-x^2/4}}, \quad (6.40)$$

tada, nakon diferenciranja, dobijamo:

$$\frac{d}{dx} \mathcal{P}_n(x) = \frac{x \sin[(n+1)\arccos(x/2)]}{(1-x^2/4)^{3/2}} - \frac{n+1 \cos[(n+1)\arccos(x/2)]}{2(1-x^2/4)}. \quad (6.41)$$

Odavde dalje sledi:

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dx^2} \mathcal{P}_n(x) &= \frac{3}{16} x^2 \frac{\sin[(n+1)\arccos(x/2)]}{(1-x^2/4)^{5/2}} - \\ &- \frac{3}{8} (n+1)x \frac{\cos[(n+1)\arccos(x/2)]}{(1-x^2/4)^2} - \\ &- \frac{1}{4} n(n+2) \frac{\sin[(n+1)\arccos(x/2)]}{(1-x^2/4)^{3/2}}. \end{aligned} \quad (6.42)$$

Eliminacijom članova: $\cos[(n+1)\arccos(x/2)]$ i $\sin[(n+1)\arccos(x/2)]$ iz poslednje jednačine i korišćenjem (6.40) i (6.41), sledi:

$$(4-x^2) \frac{d^2}{dx^2} \mathcal{P}_n(x) - 3x \frac{d}{dx} \mathcal{P}_n(x) = n(n+2) \mathcal{P}_n(x) = 0. \quad (6.43)$$

Jedno partikularno rešenje ove diferencijalne jednačine su polinomi (6.38), a drugo:

$$\mathcal{D}_n(x) = \frac{\cos[(n+1)\arccos(x/2)]}{\sin[\arccos(x/2)]}. \quad (6.44)$$

Napomenimo na kraju da se polinomi $\mathcal{P}_n(x)$ mogu izračunati i kao koeficijenti u razvoju funkcije generatrise [49]:

$$G(t, x) = \sum_{n=0}^{\infty} \mathcal{P}_n(x) t^n, \quad (6.45)$$

u okolini tačke $t = 1$ za $|t| < 1$. Koristeći rekurentnu relaciju (6.24) i početne uslove (6.23) može se pokazati da generatrisa polinoma $\mathcal{P}_n(x)$ imala oblik:

$$G(t, x) = \frac{1}{1-tx+t^2}. \quad (6.46)$$

7 Literatura

- [1] Z.Ikonić i V.Milanović: Poluprovodničke kvantne mikrostrukture, *Univerzitet u Beogradu*, Beograd 1997.
- [2] M.G.Cottam, D.R.Tilley: Introduction to Surface and Superlattice Excitations, *Univ.Press*, Cambridge 1989.
- [3] S.G.Davison and M.Steslicka: Basic Theory of Surface States, *Clarendon*, Oxford 1996.
- [4] L.Esaki, *IEEE J. Quantum Electronics* 22, 1611 (1986).
- [5] C.W.J.Beenakker and H. van Houten: Quantum Transport in Semiconductor Nanostructures, Solid State Physics Vol. 44: Semiconductor Heterostructures and Nanostructures, *Academic*, Boston 1991.
- [6] M.Pruton: Introduction to Surface Physics, *Calnerdon*, Oxford 1995.
- [7] Growth and Characterization of Semiconductors, ed. by R.A.Stradling, P.C.Klirstein and A.Hilger, Bristol 1990.
- [8] H.Watanabe: The Physics and Fabrication of Microstructures, ed. by M.J.Kelly and C.Weisbuch, Springer 158 (1986).
- [9] Nanostructure Physics and Fabrication, ed. by M.A.Reed and W.P.Kirk, *Academic* Boston 1989.
- [10] Z.W.Lu, B.M.Klein and A.Zunger, *Superlattices and Microstructures* 18, 161 (1995).
- [11] C.Weisbuch and B.Winter: Quantum Semiconductor Structures *Academic* (chapter 6), San Diego 1991.
- [12] C.W.Chu: Novel High Temperature Superconductor and High Superconductivity Physics, *Submitted to the Proceedings of Conference of Superconductivity (TICS'95)*, Hualien (Taiwan, Republic of China), 1995.
- [13] D.Esteve et.al, *Europhys.Lett.* 3, 1237 (1987).
- [14] P.W.Anderson, *Science* 235, 1196 (1987).
- [15] D.Raković: Fizički osnovi elektrotehničkih materijala, *Naučna knjiga*, Beograd 1995.
- [16] I.Supek: Teorijska fizika i struktura materije, *Školska knjiga*, Zagreb 1977.
- [17] C.Kittel: Introduction to Solid State Physics, *Wiley*, New York 1971.
- [18] A.I.Ansel'm: Vvedenie v teoriyu poluprovodnikov, *Nauka*, Moskva 1990.
- [19] N.W.Ashcroft and N.D.Mermin: Solid State Physics, *Holt*. New York 1976.
- [20] N.B.Brandt i S.M.Chudinov: Elektrony i fonony v metalah, *MGU*, Moskva 1980.
- [21] G.Mahan: Many Particle Physics, *Plenum Press*, New York 1990.
- [22] W.Jones and N.H.March: Theoretical Solid State Physics, *Dover*, New York 1985.
- [23] A.S.Davydov: Teoriya tverdogo tela, *Nauka*, Moskva 1976.
- [24] S.M.Stojković: Spektri i stanja nosilaca nanelektrisanja i transportne karakteristike kvazidvodičnizacionih superprovodnih materijala (mr. teza), *Elektrotehnički fakultet*, Beograd 1997.

- [25] E.Lazo, *Phys.Stat.Sol.(b)* **167**, 95 (1991).
- [26] L.D.Landau i E.M.Lifshic: Statisticheskaya fizika, *Nauka*, Moskva 1961.
- [27] J.M.Ziman: Principles of the Theory of Solids, *Univ.Press*, Cambridge 1972.
- [28] C.Kittel: Quantum Theory of Solids, *Wiley*, New York 1963.
- [29] M.Pantić: Provodne i superprovodne osobine dopiranih metalnih filmova (dr. disertacija), *Prirodno-matematički fakultet*, Novi Sad 1997.
- [30] D.Lj.Mirjanić, B.S.Tošić, S.M.Stojković and J.P.Šetrajčić, *Bul.Stii.Univ. Politehnica Timisoara* (Mat.Fiz.) **43**, 121 (1998).
- [31] E.K.U.Gross: Density Functional Theory and Time-Dependent Density Functional Theory, *Spring College on Electronic Structure Approaches to the Physics of Materials*, ICTP - Abdus Salam, Trieste 15.05-09.06. 2000.
- [32] J.L.Martins: Introduction to Band Structure, *Spring College on Electronic structure Approaches to the Physics of Materials*, ICTP - Abdus Salam, Trieste 15.05-09.06. 2000.
- [33] B.S.Tošić: Statistička fizika, *IF PMF*, Novi Sad 1978.
- [34] G.Rickayzen: Green's Functions and Condensed Matter, *Ac.Press*, London 1980.
- [35] E.N.Economou: Green's Functions in Quantum Physics, *Springer*, Berlin 1979.
- [36] D.S.Sondheimer: Green's Functions for Solid State Physics, *Benjamin*, New York 1974.
- [37] N.M.Plakida: Nekotorye voprosy kvantovoi teorii tverdogo tela, MGU, Moskva 1974.
- [38] A.Rubio: Many-Body Perturbation Theory and Electron Gas, *Spring College on Electronic structure Approaches to the Physics of Materials*, ICTP - Abdus Salam, Trieste 15.05-09.06. 2000.
- [39] S.G.Louie: Quasiparticle Excitations and GW Lectures, *Spring College on Electronic structure Approaches to the Physics of Materials*, ICTP - Abdus Salam, Trieste 15.05-09.06. 2000.
- [40] L.C.Jackson: Low Temperature Physics, *Wiley*, New York 1962.
- [41] B.J.McClelland: Statistical Thermodynamics, *Chapman*, London 1973.
- [42] N.N.Bogolyubov: Izbrannye trudy, *Naukova dumka*, Kiev 1971.
N.N.Bogolyubov: Sobrannye sochineniya, *Naukova dumka*, Kiev 1971.
- [43] E.M.Lifshic i L.P.Pitaevskii: Statisticheskaya fizika, *Nauka*, Moskva 1978.
- [44] E.S.R.Gopal: Statistical Mechanics and Properties of Matter, *Wiley*, New York 1974.
- [45] Lj.Ristovski: Teorija kondenzovanog stanja, *Fizički fakultet*, Beograd 1994.
- [46] Ž.A.Spasojević i Z.V.Popović: Elektrotehnički i elektronski materijali, *Promezzia*, Beograd 1995.
- [47] N.B.Brandt i S.M.Chudinov: Eksperimentalnie metody isledovaniya energeticheskikh spektrov elektronov i fononov v metalah, *MGU*, Moskva 1983.
- [48] K.Kao i V.Huang: Perenos elektronov v tverdyh telah, *Mir*, Moskva 1984.
- [49] D.S.Mitrinović: Uvod u specijalne funkcije, *Gradj.knjiga*, Beograd 1972.
- [50] I.S.Gradshtein i I.M.Ryzhik: Tablyci integralov, summ, ryadov i proizvodenii, *Fizmatgiz*, Moskva 1962.
- [51] F.M.Kuhi: Statisticheskaya fizika i termodinamika, *Nauka*, Moskva 1981.
- [52] Č.Kittel: Statisticheskaya termodinamika, *Nauka*, Moskva 1977.

- [53] J.P.Šetrajčić: Superprovodljivost danas, 33. Jugoslovenska konferencija ETAN, Novi Sad 1989.
- [54] Problema vysokotemperaturnoi sverhprovodimosti, red. V.L.Ginzburg i D.A.Kirzhnic, Nauka, Moskva 1977.
- [55] Solid State Physics, Vol.48, ed. H.Ehrenreich and F.Spaepen, Ac.Press, Boston 1994.
- [56] Special issue: High Tc Superconductivity, *Chemtronics* 2/3 (1987).
- [57] S.K.Jaćimovski i S.M.Stojković: Superprovodnost i metrologija - Džozefsonovi spojevi i SQUID uredjaji (seminarski rad), Elektrotehnički fakultet, Beograd 1997.
- [58] J.P.Šetrajčić, et.al, Superconductivity and Energetics, *Proc. Int.Simp.Energetics an Power Supply Technologies - NS*, 512 (1995).
- [59] B.S.Tošić, D.Lj.Mirjanić i J.P.Šetrajčić: Spektri elementarnih pobudjenja u anizotropnoj film-strukturi - model superprovodnih keramika, *Društvo fizičara Republike Srpske*, Banja Luka 1995.
- [60] J.G.Bednorz and K.H.Müller, *Rev.Mod.Phys.* 60, 585 (1988).
- [61] J.Keller, in High Tc Supercoductors, *World Scientifics*, Singapore 1988.
- [62] L.L.Chang and L.Esaki, *Phys. Today*, Oct.36 (1992).
- [63] S.F.Yoon, Y.B.Miao and K.Radhakisanan, *Thin Solid Films* 279, 11 (1996).
- [64] Y.Sato and D.Sato, *Thin Solid Films* 281 - 282, 445 (1996).
- [65] R.G.Mints and I.B.Sapiro: Electromagnetic Waves in a Josephson Junction in a Thin Film, <http://arxiv.org/list/cond-mat/9407109>
- [66] M.Tinkham and C.J.Lobb, Physical Properties of the New Superconductors, R.Beyers and T.M.Shaw, The Structure of $Y_1Ba_2Cu_3O_{7-\delta}$ and its Derivates, K.C.Hass, Electronic Structure of Copper-Oxide Superconductors, in Solid State Physics - Advances in Research and Applications, Eds. H.Ehrenreich and D.Turnbull, Vol.42 *Academic Press*, San Diego 1989.
- [67] M.Pantić, S.Lazarev, S.M.Stojković, J.P.Šetrajčić, D.Lj.Mirjanić, Z.Rajilić and S.K.Jaćimovski, *SPIE-PL Proc. 5th International Conference on Dielectric and Related Phenomena (DRP)*, 37DP, 168 (1999).
- [68] J.P.Šetrajčić, S.M.Stojković, S.B.Lazarev, I.D.Vragović and D.Lj.Mirjanić, *SPIE-PL Proc. 5th DRP*, 37DP, 162 (1999).
- [69] I.D.Vragović, S.M.Vučenović, J.P.Šetrajčić, S.M.Stojković, D.Lj.Mirjanić i D.Raković, *Zbornik radova - 2. Simpozijum industrijska elektronika (INDEL)*, 33 (1999).
- [70] W.Hoffman, K.Schmidt, T.Fritz, T.Hasche, V.M.Agranovich and K.Leo: The Mixing of Frenkel and Charge Transfer Excitons in 1D Structures: Application to PTCDA and MePTCDI, *NATO Advanced Research Workshop: Multiphoton and Light Driven Multi-electron Processes: Materials, Phenomena, Application*, Menton (France), Aug. 26.-31. 1999. (Submitted for Proc. 1999).
- [71] P.Pervan, T.Valla and M.Milun, *Surface Science* 397, 270 (1998).
- [72] S.Lazarev: Teorijska istraživanja električnih i magnetnih svojstava tankih filmova (dr. disertacija), *Prirodno-matematički fakultet*, Novi Sad 1997.
- [73] D.Lj.Mirjanić, S.M.Stojković, J.P.Šetrajčić and S.K.Jaćimovski, *IEEE - Proc. 20th International Conference on Microelectronics (MIEL)* 1, 177 (1995).
- [74] J.P.Šetrajčić, S.M.Stojković, S.Lazarev, D.Lj.Mirjanić and S.K.Jaćimovski, *Proceedings 4th International Conference on Low Temperature Engineering (Cryogenics)*, 103 (1996).

- [75] S.K.Jaćimovski, S.M.Stojković, A.Slavković, J.P.Šetrajčić, D.Lj.Mirjanić and S.Lazarev, *Zbornik Matice srpske* (pr.nauke) **90**, 95 (1996).
- [76] J.P.Šetrajčić, D.Lj.Mirjanić, Z.V.Bundalo, Z.Rajilić, S.Lazarev, M.Pantić, V.M.Zorić, N.V.Delić, A.S.Utješanović, S.M.Stojković, S.K.Jaćimovski, I.D.Vragović i A.Slavković, *SFIN* **9/1**, 102 (1996).
- [77] D.Lj.Mirjanić, J.P.Šetrajčić, S.M.Stojković, I.D.Vragović and S.K.Jaćimovski, *IEEE - Proc. 21th MIEL* **1**, 121 (1997).
- [78] J.P.Šetrajčić, S.M.Stojković, B.Abramović and S.Lazarev, *Bal.Phys.Lett.* **5**, 414 (1997).
- [79] J.P.Šetrajčić, S.Lazarev, S.M.Stojković, S.K.Jaćimovski and D.Lj.Mirjanić, *Bul.Stii.Univ. Politehnica Timisoara* (Mat.Fiz.) **42**, 50 (1997).
- [80] I.D.Vragović, S.M.Stojković, B.Abramović, J.P.Šetrajčić, S.K.Jaćimovski i D.Lj.Mirjanić, *Zbornik saopštenja - Elektron - sto godina od otkrića* **7**, 145 (1997).
- [81] S.K.Jaćimovski, I.D.Vragović, S.M.Stojković, J.P.Šetrajčić i D.Lj.Mirjanić, *Zbornik radova - 1. INDEL*, 18 (1997).
- [82] D.Lj.Mirjanić, D.Raković, J.P.Šetrajčić, S.M.Stojković, I.D.Vragović and S.K.Jaćimovski, *Solid State Phenomena* **61-62**, 197 (1998).
- [83] D.Lj.Mirjanić, S.B.Lazarev, S.K.Jaćimovski, I.D.Vragović, S.M.Stojković and J.P.Šetrajčić, *Bul.Stii.Univ. Politehnica Timisoara* (Mat.Fiz.) **44**, 84-90 (1999).
- [84] L.T.Kešišina and E.L.Nagaev, *Fizika tverdih tela* **30**, 1763 (1988).
- [85] J.P.Šetrajčić, S.M.Stojković, S.Lazarev, D.Lj.Mirjanić and M.Budinčević, *Zbornik radova - 10. Seminar primenjene matematike (Prim)*, 73 (1996).
- [86] D.Lj.Mirjanić, S.M.Stojković i J.P.Šetrajčić, *Zbornik radova - 41. ETRAN*, 400 (1997).
- [87] S.M.Stojković, D.D.Šijačić, I.K.Junger, I.R.radivojević i S.B.Lazarev, *Zbornik radova 10. Kongres fizičara Jugoslavije* **1**, 279 (2000).
- [88] S.M.Stojković, D.D.Šijačić, I.K.Junger and J.P.Šetrajčić, Spectra and States of Electrons in Layered Crystalline Structures, *NBP-Beograd* - prihvaćeno (2000).
- [89] S.M.Stojković, J.P.Šetrajčić, D.Raković, S.K.Jaćimovski i D.Lj.Mirjanić, *Tehnika - Novi materijali* **7/1**, 1 (1998).
- [90] S.M.Stojković and J.P.Šetrajčić, *NBP-Beograd* **3/1**, 39 (1998).
- [91] T.M.Nenadović i T.M.Pavlović: Fizika i tehnika tankih slojeva, *Institut za nuklearne nauke Vinča*, Beograd 1997.
- [92] J.P.Šetrajčić, S.M.Stojković, D.Šijačić i I.D.Vragović, *J.Res.Phys.* **27**, 155 (1998).
- [93] S.Lazarev, S.K.Jaćimovski, S.M.Stojković, J.P.Šetrajčić, I.D.Vragović and D.Lj.Mirjanić, Microtheory of Thin Layered Crystalline Structures, *12. PriM*, Palić 1997.
- [94] V.N.Luckii i T.N.Pinsker: Dymenzionaya kvantizaciya, *Znanie*, Moskva 1983.
- [95] V.N.Luckii, *Phys.Stat.Sol (a)* **1**, 199 (1970), *FIZIKA* **9** (1983).
- [96] S.M.Stojković, S.K.Jaćimovski, S.Lazarev, J.P.Šetrajčić and D.Lj.Mirjanić, *Zbornik radova PMF-fizika* (Novi Sad) **24/25**, 84 (1995).
- [97] J.P.Šetrajčić, I.D.Vragović, S.M.Stojković, D.Raković, D.Lj.Mirjanić, i S.K.Jaćimovski, *Zbornik radova - 42. ETRAN*, 328 (1998).
- [98] R.Notzel, L.Daweritz and K.Ploog, *Phys.Rev B* **46**, 44736 (1992).
- [99] P.G.de Gennes: Superconductivity of Metals and Alloys, *Benjamin*, New York 1966.

- [100] S.M.Stojković i S.K.Jaćimovski: Superprovodnost - fenomen, efekti i materijali (seminarski rad), *Elektrotehnički fakultet*, Beograd 1997.
- [101] J.Bardeen, L.N.Cooper and J.R.Schrieffer, *Phys.Rev.* **108**, 1175 (1957).
- [102] S.B.Lazarev, M.Pantić and B.S.Tošić, *Physica A* **246**, 53 (1997).
- [103] A.Rubio and M.L.Cohen, *Phys.Rev. B* **51**, 4343 (1995).
- [104] L.C.Andreani: Confined Electrons and Photons: Optical Transitions, Excitons and Polaritons in Bulk and Low-Dimensional Semiconductive Structures, ed. by E.Burstein and C.Weisbuch, *Plenum Press* p57, New York 1995.
- [105] I.D.Vragović: Spektri i stanja eksitona i dielektrične osobine molekulskih kristalnih filmova (mr. teza), *Elektrotehnički fakultet*, Beograd 1999.
- [106] D.S.Mitrinović, D.Mihajlović i P.M.Vasić, Linearna algebra, polinomi, analitička geometrija, *Gradjevinska knjiga*, Beograd 1990.
- [107] D.L.Mills and A.A.Maradudin, *J.Phys.Chem.Sol.* **28**, 1855 (1967).
- [108] P.F.Kvencel and S.I.Pekar, *Fizika tverdih tela* **4**, 2813 (1962).
- [109] A.D.Singh, *Phys.Lett.* **16** 98 (1965).
- [110] J.P.Šetrajčić and M.Pantić, *Phys.Lett. A* **192**, 292 (1994).
- [111] R.P.Feynman, Statistical Mechanics, W.A.Benjamin, Inc. Advanced Book Program Reading, Massachusetts 1972.
- [112] S.B.Lazarev, M.Pantić, S.M.Stojković, B.S.Tošić and J.P.Šetrajčić, *J.Phys.Chem.Sol.* **61**, 931 (2000).
- [113] CRC Handbook of Chemistry and Physics, 70th ed. *Rubber*, Cleveland 1989/90.
- [114] L.Esaki and R.Tsu, *IBM J.Res.Dev.* **14**, 61 (1970).
- [115] H.T.Grahn, J.Kastrup, K.Ploog, L.L.Bonilla, J.Galan, M.Kindelan and M.Moscoso, *Jpn.J.Appl.Phys.* **34**, 4562 (1995).
- [116] G.H.Dohler, *Phys.Stat.Sol.(b)* **52**, 79 (1972).
- [117] A.Sibille, J.F.Palmier, H.Wang and F.Mollot, *Phys.Rev.Lett.* **64**, 52 (1990).
- [118] M.Dignam, J.E.Sipe and J.Shan, *Phys.Rev. B* **49** 10502 (1994).
- [119] K.Leo, *Phys. Scripta* T68, 78 (1996).
- [120] H.T.Grahn, W.Muller, K von Klitzing and K.Ploog, *Surface Science* **267**, 579 (1992).
- [121] N.A.Gippius, G.A.Kopelevich, A.Y.Sivachenko, S.G.Tikhodeev and A.L.Yablonski, *Surface Science Lett.* **264**, 223 (1992).
- [122] G.T.Einevoll and P.C.Hemmer, *Semicond.Sci.Technol.* **6**, 590 (1991).
- [123] B.D.Rouhani, L.Dobrzynski and P.Masri, *Phys.Rev. B* **31/12**, 7739 (1985).
- [124] S.Erkoc, *Phys.Rev. B* **36**, 3459 (1987).
- [125] M.D.Levva and J.L.Gondar, *Phys.Stat.Sol. (b)* **128**, 575 (1985).
- [126] R.H.Yu, *Phys.Rev. B* **47**, 1379 (1993).
- [127] S.Erkoc and S.Ciraci, *Phys.Rev. B* **34/6**, 4360 (1986).
- [128] W.L.Bloss, *Phys.Rev. B* **44**, 8035 (1991).
- [129] A.Wacker and Ben Yu-Kuang Hu, *Phys.Rev. B* **60** 16039 (1999).
- [130] A.Wacker and A.P.Jauho, *Phys.Rev.Lett.* **80** 369 (1998).
- [131] S.M.Stojković, J.P.Šetrajčić, D.Šijačić, I.D.Vragović, D.Lj.Mirjanić i S.B.Lazarev, *Zbornik radova - 2. INDEL*, 27 (1999).

- [132] S.M.Stojković, J.P.Šetrajčić, I.Junger, I.D.Vragović and S.B.Lazarev, *IEEE - Proc. 22nd MIEL* **1**, 177 (2000).
- [133] D.Šijačić, I.D.Vragović, S.M.Stojković, J.P.Šetrajčić i D.Lj.Mirjanić, *Tehnika - NM* **9/2**, 6 (2000).
- [134] I.K.Junger, S.M.Stojković and J.P.Šetrajčić, Spectra and States of Electrons in $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ Superlattice, *Surface Science* - poslato (2000).
- [135] I.D.Vragović, S.M.Stojković, D.D.Šijačić and J.P.Šetrajčić, Green's Function Method Approach to Electron Configuration of Superlattices, *14. PriM*, Palić (2000).
- [136] D.L.Y.Ting and Y.C.Chang, *Phys.Rev. B* **37**, 8932 (1988).
- [137] S.G.Tikhodeev, *Sol.Stat.Comm.* **78**, 339 (1991).
- [138] M.Steslicka, R.Kucharzyk and M.L.Glasser, *Phys.Rev. B* **42**, 1458 (1990).
- [139] F.D.Adame, A.Sanchez and E.Diez, Quasi-Ballistic Electron Transport in Random Superlattices, <http://arxiv.org/list/cond-mat/9408002>.
- [140] L.L.Bonilla, J.Galan, A.Cuesta, F.C.Martinez and J.M.Molera, Dinamic of Electric Field Domains and Oscillations of the Photocurrent in Simple Superlattice Model, <http://arxiv.org/list/cond-mat/9406088>.
- [141] D.P.Woodruff, M.Milun and P.Pervan, *J.Phys.Cond.Matt.* **11**, 105 (1999).
- [142] H.Ohno, E.E.Mendez, J.A.Brum, J.M.Hong, F.A.Rueda, L.L.Chang and L.Esaki, *Phys.Rev.Lett* **64**, 2555 (1990).
- [143] E.Diez, F.D.Adame, E.Macia and A.Sanchez, Dynamical Phenomena in Fibonacci Semiconductor Superlattices, <http://arxiv.org/list/cond-mat/9610138> (1999).
- [144] M.V.Simkin and G.D.Mahan, Minimum Thermal Conductivity of Superlattices, <http://arxiv.org/list/cond-mat/9970368> (2000).
- [145] D.Lj.Mirjanić, J.P.Šetrajčić, S.M.Stojković, D.Šijačić and I.D.Vragović, *IEEE - Proc. 22nd MIEL* **1**, 173 (2000).
- [146] I.D.Vragović, J.P.Šetrajčić and S.M.Stojković, Application of Green's Function Method in the Analysis of Electronic Structure of Nanotubes *Full.Sci.Technol.Rev.* - prihvaćeno (1999).
- [147] S.M.Stojković, J.P.Šetrajčić and I.D.Vragović, Electron Configuration of Nanotubes *Material Science Forum* - prihvaćeno (2000).
- [148] I.D.Vragović, S.M.Stojković, Dj.Koruga i D.Raković, *Zbornik radova - 10. Kongres fizičara Jugoslavije* **1**, 223 (2000).
- [149] I.D.Vragović, R.Fürstenberg, S.M.Stojković, J.P.Šetrajčić and D.Lj.Mirjanić, *Novi Sad J.Math.* **30/3**, 185-190 (2000).
- [150] I.Junger, S.M.Stojković, J.P.Šetrajčić, I.D.Vragović i S.B.Lazarev, *Tehnika - NM* **9/2**, 1 (2000).
- [151] S.M.Stojković, J.P.Šetrajčić, D.Šijačić and I.Junger, Electron States in Surface Perturbed Quantum Wires, *18th European Conference on Surface Science (ECOSS)*, Vienna (Austria) 1999.

**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: Doktorska disertacija
VR
- Autor: Mr Sladjana Stojković
AU
- Mentor: Prof.dr Jovan Šetrajčić, redovni profesor, PMF, Novi Sad
MN
- Naslov rada:
Svojstva sistema nosilaca nanelektrisanja u slojevitim kristalnim strukturama
NR
- Jezik publikacije: Srpski (latinica)
JP
- Jezik izvoda: Srpski, engleski
JI
- Zemlja publikovanja: SR Jugoslavija
ZP
- Uže geografsko područje: Srbija, Vojvodina, Novi Sad
UGP
- Godina: 2000.
GO
- Izdavač: Autorski reprint
IZ
- Mesto i adresa: Institut za fiziku, Prirodno-matematički fakultet,
Trg Dositeja Obradovića 4, Novi Sad
MA
- Fizički opis rada: Rad se sastoji iz 7 glava, 114 strana, 151 citata u bibliografiji, 11 tabela,
42 slike, 144 grafika, 2 priloga
FO
- Naučna oblast: Fizika
NO
- Naučna disciplina: Fizika čvrstog stanja
ND

- Predmetna odrednica / ključne reči: Tanki filmovi, superrešetke, elektronski spektri, termodinamičke osobine, Grinove funkcije
PO

UDK:

- Čuva se: Biblioteka Instituta za fiziku, PMF Novi Sad
ČU
- Važna napomena:
VN
- Izvod:

Predmet istraživanja ove disertacije su spektri i stanja nosilaca nanelektrisanja, kao i termodinamičke osobine slojevitih kristalnih struktura (tanki filmovi i superrešetke). Za analizu elektronskih svojstava posmatranih sistema primenjen je metod Grinovih funkcija. Narušenje translacione simetrije u ovim strukturama dovodi do izmenjenog ponašanja u odnosu na masivne uzorke. Stoga je posebna pažnja posvećena ispitivanju uticaja granica i izmenjenih graničnih i energetskih parametara na elektronske osobine ovih struktura. Pogodnim izborom debljine slojeva, graničnih uslova, kao i graničnih i/ili energetskih parametara mogu se bitno poboljšati transportna, termodinamička i druga svojstva, koja su značajna sa stanovišta praktične primene ovih struktura.

IZ

- Datum prihvatanja teme od strane Veća: 24. jun 1999. godine
DP
- Datum odbrane:
DO
- Članovi komisije:

Predsednik:

Prof.dr Bratislav Tošić redovni profesor, PMF, Novi Sad

Član:

Prof.dr Jovan Šetrajčić, redovni profesor, PMF, Novi Sad, mentor

Član:

Prof.dr Ljiljana Mašković, redovni profesor, PMF, Novi Sad

KO

UNIVERSITY OF NOVI SAD
FACULTY OF SCIENCES

KEY WORD DOCUMENTATION

- Accession number:
ANO
- Identification number:
INO
- Document type: Monographic type
DT
- Type of record: Text printed material
TR
- Contents code: Doctoral thesis
VR
- Author: M.Sci Sladjana Stojković
AU
- Mentor: Prof.dr Jovan Šetrajić, full professor, Faculty of Sciences, Novi Sad
MN
- Titel:
Properties of Charge Carrier System in Layered Crystalline Structures
TI
- Language of text : Serbian, Latin
LT
- Language of abstract: Serbian, English
LA
- Country of publication: Federal Republic of Yugoslavia
CP
- Locality of publication: Serbia, Vojvodina, Novi Sad
LP
- Publication year: 2000.
PY
- Publisher: Author's reprint
PU
- Publication place: Institute of Physics, Faculty of Sciences,
Trg Dositeja Obradovića 4, Novi Sad
PP
- Physical description: Thesis is made by 7 chapters, 114 pages, 151 citation in literature,
11 tables, 42 figures, 144 graphics, 2 additional lists
PD
- Scientific field: Physics
SF
- Scientific discipline: Solid State Physics
SD

- Subject / key words: Thin films, superlattices, electron spectra, thermodynamic properties, Green's functions
SKW

UC:

- Holding data: The library of Institute of Physics, Faculty of Sciences, Novi Sad
HD
- Note:
N
- Abstract:

The subject of the theoretical studies of this Thesis is spectra and states of charge carriers and thermodynamic characteristics of thin layered crystalline structures (thin films and superlattices). In order to study properties of electrons in these structures, Green's function method was applied. Breaking of translational symmetry of these structures leads to new properties and to specific effects in comparison to the bulk ones. Consequently, special attention was paid to the influence of boundaries and variety of boundary and/or energy parameters to these properties. By suitable choice of layers thickness, as well as boundary conditions and energy parameters one can improve transport, thermodynamic and some other properties of materials, which are of great practical interest.

AB

- Accepted by Scientific Board on: June 24, 1999.
ASB
- Defended:
DE
- Thesis defended board:

President:

Prof.dr Bratislav Tošić, Full Professor, Faculty of Sciences, Novi Sad

Member:

Prof.dr Jovan Šetrajčić, Full Professor, Faculty of Sciences, Novi Sad, mentor

Member:

Prof.dr Ljiljana Mašković, Full Professor, Faculty of Sciences, Novi Sad

DB