

Примљено: 12. aprila 1995.			
Орг. јед.	Број	Аризог	Вредност
0603	9/49		

УНИВЕРЗИТЕТ У НОВОМ САДУ
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ
ИНСТИТУТ ЗА ФИЗИКУ

Sladjana Stojković

**ELEKTRONSKA STANJA
У FILM-STRUKTURAMA**

- DIPLOMSKI RAD -

NOVI SAD, 1995.

„Ništa nije praktičnije od teorije“
Bolcman

Ovaj rad je izradjen u Laboratoriji za teorijsku fiziku,
Instituta za fiziku Prirodno-matematičkog fakulteta u
Novom Sadu, pod mentorstvom prof.dr.Jovana Šetrajčića.

Koristim priliku da se zahvalim mentoru, kao i kolegama V.Zoriću,
A.Utješanoviću i N.Deliću na pomoći prilikom izrade ovog rada.



SADRŽAJ

	Strana
1. UVOD	4
2. ELEKTRONI U KRISTALIMA	5
2.1 Provodni elektroni u metalima	7
2.2 Elektroni u periodičnom potencijalu	8
2.3 Redukovani talasni vektor	11
2.4 Prebrojavanje stanja	12
2.5 Primitivna kubna rešetka	13
2.6 Brzina i ubrzanje elektrona	15
2.7 Tenzor recipročne efektivne mase	15
2.8 Elektroni i šupljine	17
2.9 Elektronski hamiltonijan	19
2.10 Elektronske Grinove funkcije	20
2.11 Elektronski spektri i efektivna masa	23
3. ELEKTRONI U TANKIM FILMOVIMA	25
4. ZAKLJUČAK	37
5. DODATAK I : Grinove funkcije u teorijskoj fizici čvrstog stanja	38
6. DODATAK II: Polinomi Čebiševa	42
7. LITERATURA	43

1. U V O D

Predmet ovog rada je ispitivanje elektronskih stanja i spektara u kristalnim film-strukturama i njihovo poredjenje sa istim u idealnim, beskonačnim strukturama. U teoriji kondenzovane materije se najčešće analiziraju strukture koje su prostorno homogene i poseduju osobinu translacione invarijantnosti. Međutim, u praksi idealno čiste strukture ne postoje. Pored toga, kristali poseduju granične površine na kojima dolazi do specifičnih efekata i fizičkih fenomena, a oni se ne mogu objasniti metodama teorije idealnih struktura. Postojanje graničnih površina, pored uticaja nečistoća (primesa, defekata, vakancija i sl.), kod ovih struktura dovodi do narušenja translacione simetrije. Upravo zbog toga je značajna analiza elektronskih stanja u realnijim kristalnim strukturama, kao što su npr. filmovi.

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

U većem broju diplomskih radova, novijeg datuma, ispitana je uticaj fononskog pod sistema na fizičke karakteristike kristalne strukture, međutim od velikog značaja je i ispitivanje sledećeg fundamentalnog pod sistema - elektrona, jer su upravo oni nosioci svih transportnih fizičkih procesa. U ovom radu istraženi su energetski spektri i moguća stanja elektrona (zakon disperzije).

Prilikom gore pomenute analize korišćen je metod Grinovih funkcija, koji predstavlja jedan u nizu metoda pomoću kojih se ovaj problem može tretirati. Pored tog metoda postoje i mnogi drugi kao što su: metod Hajzenbergovih jednačina kretanja, metod malih perturbacija, metod talasnih funkcija i sl. Primenjeni metod je odabran zbog pogodnosti koje nam nudi definicija polova Grinovih funkcija, i to:

- realni delovi polova, proporcionalni su energijama elementarnih eksicitacija (pobudjenja) koje se javljaju u sistemu, odakle dobijamo zakon disperzije elektrona,
- imaginarni delovi polova proporcionalni su recipročnim vrednostima vremena života tih ekscitacija.

Odabranom metodom najpre su vršena istraživanja na idealnim beskonačnim strukturama, a zatim na kristalnim filmovima i to iz dva razloga:

- provere metoda na poznatim rezultatima,
- da bi se na osnovu tih rezultata uočile razlike za film strukturu.

2. ELEKTRONI U KRISTALIMA

Veliki broj važnih fizičkih osobina možemo razumeti polazeći od 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 između provodnih elektrona i jona se zanemaruju, tj. smatra se da se provodni elektroni mogu kretati svuda u unutrašnjosti uzorka. Totalna energija je jednaka kinetičkoj, što znači da se potencijalna ne uzima u obzir.

Poznato je da je stvarna raspodela provodnih elektrona rezultat uticaja jakog električnog potencijala jona. Upotrebljivost ovog modela zavisi od kinetičkih svojstava provodnih elektrona. Postavke ovog modela bile su date mnogo pre otkrića kvantne mehanike. Klasična teorija je imala nekoliko uspeha ali i nedostataka. U uspehe spadaju izvodjenje Omovog zakona ($j = \sigma E$) i izvodjenje veze između električne i toplotne provodnosti. Međutim, totalni neuspeh je doživela u objašnjenju toplotnog kapaciteta i paramagnetne susceptibilnosti provodnih elektrona. Zatim, pomoću klasične teorije ne može se objasniti postojanje dugog slobodnog puta elektrona. Provodni elektron može da se kreće u metalu po pravoj putanji dužine većeg broja medjuatomskih rastojanja a da se ne sudari sa drugim elektronima ili atomskim ostacima. Odnosno, provodni elektroni se u tom smislu ponašaju kao gas neinteragujućih čestica. Razlozi za to su:

Slobodan elektron ne skreće pod uticajem jona uredjenih u periodičnu rešetku, jer se talasi materije prostiru slobodno u periodičnim strukturama. Provodni elektroni se retko sudare sa drugim elektronima što je posledica Paulijevog principa isključenja.

Elektrone u metalima možemo uz grublje aproksimacije posmatrati kao i elektrone u Fermijevom gasu slobodnih elektrona (gas slobodnih neinteragujućih elektrona podvrgnutih Paulijevom principu).

Posmatramo fermionski gas, kod koga su energije zadate kinetičkom energijom translacije. Energija čestice je:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

gde je $\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$, \vec{k} - talasni vektor.

Razmatramo slučaj:

$$e^\nu \ll 1 \quad \nu = \frac{\mu}{kT}$$

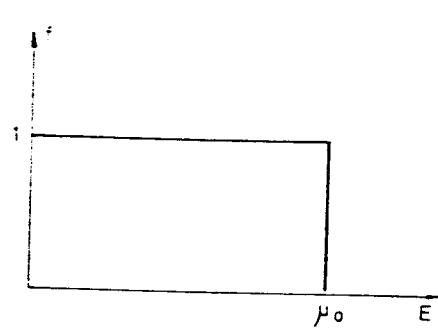
μ - hemijski potencijal.

Kvantni efekti postaju dominantniji ako je toplotna energija znatno niža od hemijskog potencijala: $\mu \gg kT$.

Čestice se pokoravaju Paulijevom principu. Na absolutnoj nuli one popunjavaju redom najniža kvantna stanja. Takav gas nazivamo potpuno degenerisanim fermionskim gasom. Značaj Paulijevog principa se znatno manifestuje u izgledu funkcije raspodele osnovnog stanja fermiona. Specijalizirajući Fermi-Dirakovu funkciju:

$$f = \left[\exp \left(\frac{E - \mu}{kT} + 1 \right) \right]^{-1}$$

na $T = 0$, $f = \begin{cases} 1 & E \leq \mu_0 \\ 0 & E > \mu_0 \end{cases}$



Slika 2.1: Fermijeva funkcija na absolutnoj nuli

μ_0 - je vrednost hemijskog potencijala na absolutnoj nuli.

Na $T = 0$ sva stanja sa energijama manjim od μ_0 su popunjena, a viša energetska stanja su prazna, pa je μ_0 jednak graničnoj energiji degenerisanog gasa.

Zauzeta stanja na $T = 0$ možemo prikazati sferom u prostoru talasnog vektora, koja se zove Fermijeva sfera. Njen radijus je Fermijev talasni vektor \vec{k}_F , koji određuje graničnu - Fermijevu energiju:

$$\mu_0 = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$$

Temperatura pridružena ovoj energiji je temperatura degeneracije: $T_F = \mu_0/k$. Fermionski gas degenerisan je u području gde važi $T \ll T_F$. Brzinu čestice obračunatu od vrha Fermijeve raspodele možemo izraziti pomoću k_F : $v_F = \hbar k_F/m$ - granična brzina fermiona na absolutnoj nuli.

Kako je ukupna energija osnovnog stanja fermionskog gasa:

$$U_0 = \int f E dN = \frac{3}{5} N \mu_0$$

srednja energija biće: $E_0 = (U_0/N) = (3/5)\mu_0$ gde je $N = \sum_i N_i$ ukupan broj čestica gasa.

2.1 Provodni elektroni u metalima

Kako smo već ranije razmotrili ponašanje idealnog Fermi-Dirakovog degenerisanog gasa, možemo te rezultate primeniti na realne fermionske sisteme. U toj aproksimaciji, koja je veoma gruba, razmatraćemo 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 ih nazivamo provodni elektroni.

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 smo pomenuli, pretrpela najveći neuspeh u objašnjenju toplotnog kapaciteta (specifične toplotne) metala. Neka je Z broj valentnih elektrona u atomu. Primenom klasične statistike, nalazi se iz zakona jednake raspodele energije 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 toplote koja se dovodi metalu. Nepojavljivanje tog člana bilo je zagonetno za klasičnu fiziku. Takvo ponašanje elektrona je objasnio Zomerfeld (1928) koji je prvi primenio Fermi-Dirakovu kvantu statistiku uz važenje Paulijevog principa i tako zasnovao kvantu teoriju metalnog stanja.

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

$$C_V^e = \frac{ZN\pi^2k_B^2T}{2\mu_0} \quad (2.1)$$

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

$$C_V^i = 3Nk_B \quad (2.2)$$

Deljenjem (2.1) i (2.2) dobija se:

$$\frac{C_V^e}{C_V^i} = \frac{\pi^2 Z T}{6T_F}$$

Temperatura degeneracije (T_F) je u metalima toliko visoka da je elektronski doprinos toplotnom kapacitetu zanemarljivo mali. Izraz (2.2) važi u području dovoljno visokih temperaturama, toplotni kapacitet kristalne rešetke proporcionalan je trećem stepenu temperature:

$$C_V^i = \frac{12\pi^4 N k_B}{5} \left(\frac{T}{\Theta}\right)^3$$

Θ - je Debajeva temperatura (u energetskim jedinicama).

Na niskim temperaturama, odnos kapaciteta je:

$$\frac{C_V^e}{C_V} = \frac{5Z\Theta}{24\pi^2 T^2 T_F}$$

U neposrednoj blizini absolutne nule u topotnom kapacitetu metala dominantniji je elektronski doprinos.

2.2 Elektroni u periodičnom potencijalu

U strogom smislu, elektroni i joni u kristalu čine jedan kvantni sistem, čije rešenje treba naći. Ovakvo postavljanje problema je suviše komplikovano, pa treba potražiti jednostavnije prilaze. Najpre, možemo elektrone zamisliti kao nezavisne čestice koje se kreću pod ukupnim uticajem svih sila. Ako zanemarimo nepravilnosti u gradji kristalne rešetke i oscilovanja atoma oko ravnotežnih položaja u rešetki, tada se svaki elektron kreće u potencijalu koji je periodičan sa periodom kristalne celije. Neka su ivice elementarne celije definisane vektorima $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$, onda su osnovne tačke rešetke date tripletom celih brojeva:

$$\vec{n} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3 \quad (2.3)$$

S obzirom na takve pomake potencijal je periodičan, što možemo izraziti uslovom:

$$U(\vec{r} + n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3) = U(\vec{r}) \quad (2.4)$$

U takvom periodičnom potencijalu talasne funkcije elektrona imaju neka opšta svojstva koja proizilaze neposredno iz Šredingerove jednačine:

$$H u = E u \quad (2.5)$$

pri čemu je Hamiltonov operator:

$$H(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{r}) \quad (2.6)$$

Uvedimo operator translacije $T_{\vec{n}}$ definisan relacijom:

$$T_{\vec{n}} F(\vec{r}) = F(\vec{r} + \vec{n}) \quad (2.7)$$

Kod dve uzastopne translacije vektora \vec{n} i \vec{n}' rezultanta ne zavisi od redosleda translacija, pa operatori $T_{\vec{n}}$ i $T_{\vec{n}'}$ medjusobno komutiraju:

$$T_{\vec{n}} T_{\vec{n}'} = T_{\vec{n}'} T_{\vec{n}}$$

Hamiltonov operator elektrona u periodičnom potencijalu ne menja se translacijom za vektor \vec{n} :

$$H(\vec{r} + \vec{n}) = H(\vec{r})$$

iz čega sledi:

$$T_{\vec{n}} H(\vec{r}) F(\vec{r}) = H(\vec{r} + \vec{n}) F(\vec{r} + \vec{n}) = H(\vec{r}) T_{\vec{n}}(\vec{r}) F(\vec{r})$$

U stvari, zbog periodičnosti kristalne rešetke operator translacije komutira sa Hamiltonovim operatom:

$$T_{\vec{n}} H = H T_{\vec{n}}$$

zbog čega su sopstvene funkcije hamiltonijana ujedno i sopstvene funkcije operatora translacije. Označimo li sa $\tau_{\vec{n}}$ sopstvenu vrednost operatora $T_{\vec{n}}$ sledi:

$$T_{\vec{n}} u(\vec{r}) = \tau_{\vec{n}} u(\vec{r}) \quad (2.8)$$

Primenjujući na levoj strani ove relacije svojstvo operatora $T_{\vec{n}}$ iz jednačine (2.7). dolazimo do:

$$u(\vec{r} + \vec{n}) = \tau_{\vec{n}} u(\vec{r}) \quad (2.9)$$

Svaki vektor translacije \vec{n} može se izraziti kao zbir druga dva vektora translacije:

$$\vec{n} = \vec{n}' + \vec{n}'' \quad (2.10)$$

pa iz jednačine (2.8) i (2.10) sledi:

$$\tau_{\vec{n}} = \tau_{\vec{n}'} \tau_{\vec{n}''} \quad (2.11)$$

U skladu sa prethodne dve jednačine, sopstvenu vrednost operatora translacije pišemo u obliku:

$$\tau_{\vec{n}} = e^{i\vec{k}\vec{n}} \quad (2.12)$$

Uvrstimo li ovo u jednačinu (2.9) dobijamo:

$$u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{n}) = e^{i\vec{k}\vec{n}} u_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (2.13)$$

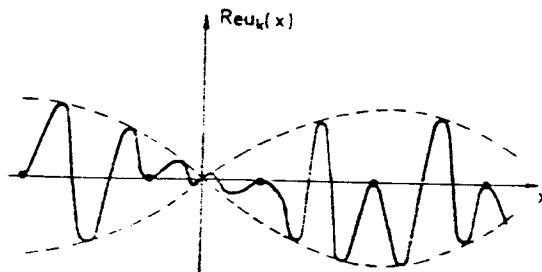
Kako talasne funkcije zavise od talasnog vektora \vec{k} označili smo ih tim indeksom. Uslov (2.13) će biti ispunjen ako je talasna funkcija elektrona jednaka proizvodu ravnog talasa i neke druge funkcije:

$$u_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} v_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (2.14)$$

za koju važi:

$$v_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{n}) = v_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (2.15)$$

To je Blohova teorema iz 1928. godine. Prvi faktor u jednačini (2.14) proizilazi iz konstantnog potencijala i u mnogome opisuje „slobodno kretanje elektrona”; drugi faktor je periodična funkcija rešetke i određuje vezivanje elektrona za kristalnu rešetku.



Slika 2.2: Realni deo Blohove funkcije uzduž čvornih veza u kristalnoj rešetki

Prema relaciji (2.13), prostornim pomeranjem za \vec{n} talasna funkcija menja samo svoju fazu, pa gustina verovatnoće ostaje kostantna:

$$|u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{n})|^2 = |u_{\vec{k}}(\vec{r})|^2$$

pri čemu smo pretpostavili da je talasni vektor \vec{k} realan. Uvrštavanjem Blohove funkcije u Šredingerovu jednačinu, dobijamo novu jednačinu za periodični faktor:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla + i\vec{k})^2 v_{\vec{k}} + U v_{\vec{k}} = E(\vec{k}) v_{\vec{k}} \quad (2.16)$$

Funkcija $v_{\vec{k}}$ mora biti ista na suprotnim stranicama celije, što su granični uslovi jednačine. Za neke energije talasni vektor \vec{k} postaje kompleksan. Takve vrednosti isključujemo iz energetskog spektra jer, u protivnom, gustina verovatnoće ne bi imala svojstvo translacione invarijantnosti. Suprotно energiji slobodnog elektrona, energija elektrona u periodičnom potencijalu ne može se kontinualno menjati. Potpuni spektar prethodne jednačine, dakle, zavisi od celog broja l i parametra \vec{k} , što se može predstaviti kao niz energetskih zona $E_l(\vec{k})$. Za svaki broj l postoji kontinuum energija odredjene širine, čije zone mogu biti razmaknute ili se prekrivaju.

2.3 Redukovani talasni vektor

Razmotrimo sada šta se dogadja sa talasnom funkcijom kada radijus-vektoru elektrona damo priraštaj \vec{a}_1 . Tada je prema Blohovoj teoremi:

$$u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{a}_1) = e^{i\vec{k}\vec{a}_1} u_{\vec{k}}(\vec{r})$$

Zamenimo talasni vektor \vec{k} nekim drugim talasnim vektorom \vec{k}' koji zadovoljava relaciju

$$\vec{k}' \cdot \vec{a}_1 = \vec{k} \cdot \vec{a}_1 + 2\pi m_1$$

gde je m_1 - ceo broj. Ova zamena ne uzrokuje promenu faznog faktora u talasnoj funkciji. Invarijantnost kvantnog sistema prema prostornim pomerajima za \vec{a}_1 , \vec{a}_2 i \vec{a}_3 ima za posledicu višezačnost talasnog vektora.

Definišimo osnovne vektore recipročnog prostora:

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\Omega_0}; \quad \vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\Omega_0}; \quad \vec{b}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\Omega_0} \quad (2.17)$$

Ω_0 - je zapremina elementarne celije:

$$\Omega_0 = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$$

Iz relacije (2.17) neposredno nalazimo:

$$\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi \delta_{ij}; \quad i, j = 1, 2, 3$$

Pomoću vektora \vec{b}_1 , \vec{b}_2 , \vec{b}_3 formiramo vektor recipročne rešetke:

$$\vec{g} = g_1 \vec{b}_1 + g_2 \vec{b}_2 + g_3 \vec{b}_3; \quad g_1, g_2, g_3 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Proizvod vektora translacije \vec{n} i vektora \vec{g} jednak je umnošku od 2π :

$$\vec{n} \cdot \vec{g} = 2\pi(n_1 g_1 + n_2 g_2 + n_3 g_3)$$

To znači da talasni vektori koji se dobijaju translacijom za vektor recipročne rešetke:

$$\vec{k} \rightarrow \vec{k}' = \vec{k} + \vec{g}$$

određuju isto stanje elektrona. Radi uklanjanja te višezačnosti, na talasni vektor postavljamo uslove:

$$-\pi < \vec{k} \cdot \vec{a}_1 < \pi; \quad -\pi < \vec{k} \cdot \vec{a}_2 < \pi; \quad -\pi < \vec{k} \cdot \vec{a}_3 < \pi \quad (2.18)$$

čime smo ga ograničili na redukovano područje. Redukovani talasni vektor ima svojstvo da su iznosi njegovih projekcija na kristalne ose minimalni.

2.4 Prebrojavanje stanja

Uместо kontinualnog talasnog vektora možemo pri računaju preći na diskretna stanja. Ako se u smerovima $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ pomaknemo respektivno za dužine L_1, L_2, L_3 moramo zahtevati da se talasne funkcije periodično ponove, pa je pri tome promena talasne funkcije izražena i faznim faktorom:

$$u_{\vec{k}}(\vec{r} + L_i \frac{\vec{a}_i}{a_i}) = e^{i \frac{L_i}{a_i} \vec{k} \cdot \vec{a}_i} u_{\vec{k}}(\vec{r}); \quad i = 1, 2, 3.$$

Talasne funkcije se redukuju na $u_{\vec{k}}(\vec{r})$ samo ako se talasni vektor može predstaviti u obliku:

$$\vec{k} = n_1 \frac{a_1}{L_1} \vec{b}_1 + n_2 \frac{a_2}{L_2} \vec{b}_2 + n_3 \frac{a_3}{L_3} \vec{b}_3 \quad (2.19)$$

Označimo broj elementarnih celija koje se nalaze na dužini L_1 sa G_1 , kako je udaljenost susednih celija a_1 , možemo pisati:

$$L_1 = G_1 a_1$$

Analogno važi za smerove \vec{a}_2 i \vec{a}_3 :

$$L_2 = G_2 a_2; \quad L_3 = G_3 a_3.$$

Ukupan broj elementarnih celija u kristalu je:

$$G = G_1 \cdot G_2 \cdot G_3$$

Pogledajmo koliko talasnih vektora leži u redukovanim području. Množeći talasni vektor vektorima $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$, dobijamo:

$$\vec{k} \cdot \vec{a}_1 = \frac{2\pi n_1}{G_1}; \quad \vec{k} \cdot \vec{a}_2 = \frac{2\pi n_2}{G_2}; \quad \vec{k} \cdot \vec{a}_3 = \frac{2\pi n_3}{G_3}$$

Ako ovo uvrstimo u relaciju (2.18) dobija se:

$$-\frac{G_1}{2} < n_1 < \frac{G_1}{2}; \quad -\frac{G_2}{2} < n_2 < \frac{G_2}{2}; \quad -\frac{G_3}{2} < n_3 < \frac{G_3}{2}$$

pa sledi da je G_i broj različitih mogućnosti izbora i -te komponente talasnog vektora. Ukupan broj talasnih vektora redukovanih područja je $G_1 \cdot G_2 \cdot G_3$. Tako dolazimo do zaključka da je broj mogućih talasnih vektora jednak broju elementarnih celija.

Broj stanja u diferencijalnom elementu \vec{k} -prostora označićemo sa dB , a izračunavamo ga iz relacije:

$$\frac{dB}{G} = \frac{d^3 k}{\Omega_b}$$

Ω_b - je zapremina elementarne celije u \vec{k} -prostoru:

$$\Omega_b = \vec{b}_1 (\vec{b}_2 \times \vec{b}_3)$$

Izražavanjem $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ pomoću $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$, sledi:

$$\Omega_b = \frac{(2\pi)^3}{\Omega_0}$$

Zapremina kristala je $V = G\Omega_0$, gde je G - broj elementarnih celija, a Ω_0 - zapremina elementarne celije. Odavde sledi da je broj stanja u elementu zapremine $d^3 k$:

$$dB = \frac{V}{(2\pi)^3} d^3 k$$

odakle se dobija pravilo transformacije:

$$\sum_k \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3 k$$

2.5 Primitivna kubna rešetka

Ova rešetka ima medjusobno normalne ose. Jedinični vektori u smeru osa x, y, z redom, označeni su kao:

$$\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3 \rightarrow \vec{a}_1 = \vec{e}_1 a; \vec{a}_2 = \vec{e}_2 a; \vec{a}_3 = \vec{e}_3 a$$

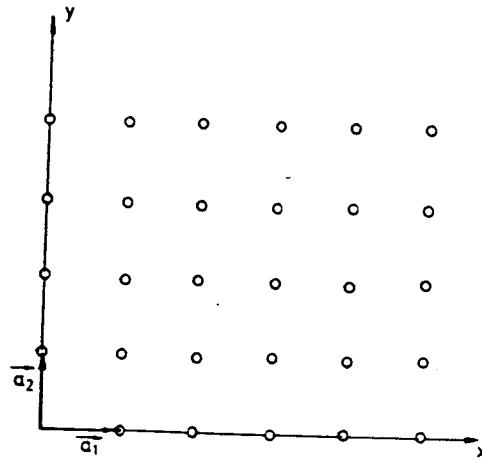
gde je a - dužina ivice elementarne kocke. Iz relacije (2.17) mogu se naći osnovni vektori recipročnog prostora:

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \vec{e}_1; \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a} \vec{e}_2; \quad \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a} \vec{e}_3$$

koji su u ovakvoj strukturi proporcionalni vektorima direktne rešetke.

Uvrstimo li $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ u relaciju (2.19) dobijamo izraz za talasni vektor:

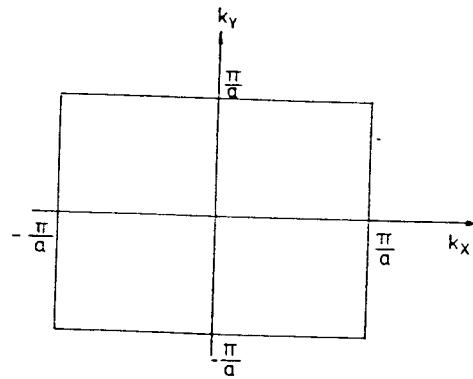
$$\vec{k} = 2\pi \left(\frac{n_1}{L_1} \vec{e}_1 + \frac{n_2}{L_2} \vec{e}_2 + \frac{n_3}{L_3} \vec{e}_3 \right).$$



Slika 2.3: Čvorovi u dvodimenzionoj primitivnoj kubnoj rešetki

Uslov da vektor \vec{k} pripada redukovanim području je da njegove komponente budu odabrane tako da važi:

$$-\frac{\pi}{a} < k_x < \frac{\pi}{a}; \quad -\frac{\pi}{a} < k_y < \frac{\pi}{a}; \quad -\frac{\pi}{a} < k_z < \frac{\pi}{a}$$



Slika 2.4: Redukovano područje talasnog vektora za primitivnu dvodimenzionu kubnu rešetku

2.6 Brzina i ubrzanje elektrona

Kako je stanje elektrona u kristalu opisano kompleksnom funkcijom, javljaju se i srednje brzine elektrona. Struje možemo izračunati iz opšteg talasno-mehaničkog izraza. Umesto da posmatramo stacionarno stanje, više nas zanima širenje talasnog paketa koji predstavlja elektron u kristalu. Grupna brzina elektrona je data kao:

$$v = \frac{d\nu}{d(1/\lambda)} = \frac{d\omega}{dk}.$$

Kako je $\nu = E/h$, gde je ν - frekvencija

$$\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla E(\vec{k}) \quad (2.20)$$

Delovanjem spoljašnjeg električnog polja, odnosno spoljašnje sile, menja se energija elektrona u jedinici vremena, za iznos:

$$e\vec{F}\vec{v} = e\vec{F} \frac{1}{\hbar} \nabla E.$$

S druge strane, promena energije kao funkcije od \vec{k} će biti:

$$\frac{dE}{dt} = \nabla E \frac{d\vec{k}}{dt}$$

Izjednačavanjem prethodna dva izraza dobijamo:

$$\frac{d\vec{k}}{dt} = \frac{e\vec{F}}{\hbar} \quad (2.21)$$

Talasni vektor se u električnom polju menja kao za slobodni elektron za koji je impuls $\vec{p} = \hbar\vec{k}$, pa jednačina (2.21) daje Njutnov zakon kretanja: $\vec{p} = e\vec{F}$. Jednačina (2.20) strogo proizilazi iz razmtranja kretanja talasnog paketa pod delovanjem električne sile.

2.7 Tenzor recipročne efektivne mase

Ako želimo da izračunamo ubrzanje elektrona u periodičnom potencijalu nastalo delovanjem električnog polja, polazimo od diferencijalne jednačine (2.20):

$$a_x = \frac{1}{\hbar} \left(\frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} \dot{k}_x + \frac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_y} \dot{k}_y + \frac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_z} \dot{k}_z \right)$$

Kako su vremenske promene talasnog vektora odredjene izrazom (2.21), za x komponentu ubrzanja nalazimo:

$$a_x = \frac{e}{\hbar^2} \left(\frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} F_x + \frac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_y} F_y + \frac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_z} F_z \right)$$

Slične relacije važe i za ostale dve komponente. Analogno izrazu za ubrzanje van delovanja periodičnog potencijala kristalne rešetke pišemo:

$$\vec{a} = \frac{e}{m^*} \vec{F} \quad (2.22)$$

gde je $\frac{1}{m^*}$ tenzor recipročne efektivne mase. Elementi ovog tenzora odredjeni su odgovarajućim izvodima po komponentama talasnog vektora:

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_y} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_z} \\ \frac{\partial^2 E}{\partial k_y \partial k_x} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_y^2} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_y \partial k_z} \\ \frac{\partial^2 E}{\partial k_z \partial k_x} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_z \partial k_y} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_z^2} \end{pmatrix} \quad (2.23)$$

Iz svojstva:

$$\frac{\partial^2 E}{\partial k_\alpha \partial k_\beta} = \frac{\partial^2 E}{\partial k_\beta \partial k_\alpha}$$

proizilazi da je ovaj tenzor simetričan. Primenimo li ovo razmatranje na model jednodimenzione rešetke, dobićemo sledeći izraz za efektivnu masu elektrona:

$$m^* = \hbar^2 \left(\frac{d^2 E}{dk^2} \right)^{-1}$$

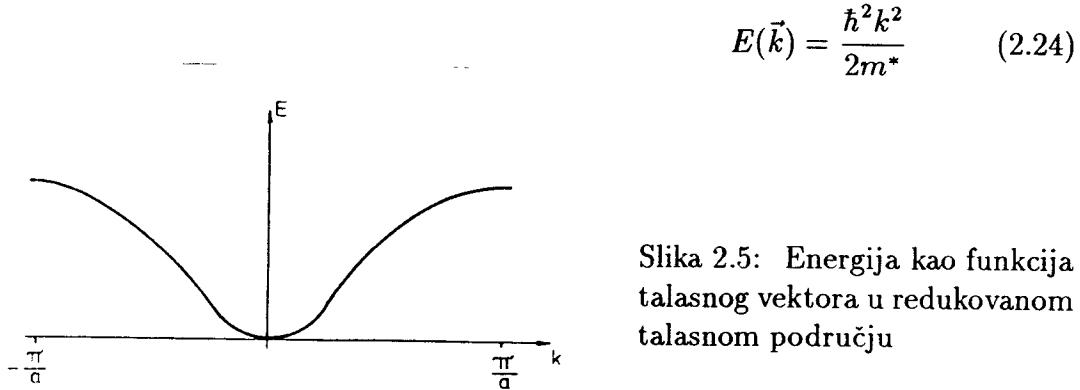
Zavisno od zakrivljenosti energetske površine, efektivna masa može biti negativna ili pozitivna (što odgovara elektronima ili šupljinama, respektivno). Ubrzanje nosioca nanelektrisanja u kristalnoj rešetki odredjeno je, ne slobodnom elektronskom masom, već skupom veličina (2.23) koje se menjaju pomeranjem elektronskog stanja u prostoru talasnog vektora.

Ovo možemo prikazati crtežom. Efektivna masa elementarnih nosioca nanelektrisanja je pozitivna oko sredine, a negativna pri kraju redukovanih područja.

Ako je energija kvadratna funkcija talasnog vektora, efektivna masa postaje skalarna veličina - nezavisna od talasnog vektora. Iz $E(\vec{k}) = Ck^2$ sledi:

$$\frac{1}{m_{\alpha\beta}^*} = \frac{2C}{\hbar^2} \delta_{\alpha\beta}$$

pa možemo pisati:



Slika 2.5: Energija kao funkcija talasnog vektora u redukovanim talasnim području

2.8 Elektroni i šupljine

Razmotrimo provodnu zonu kristala sa malim brojem elektrona koji se nalaze u najnižim energetskim stanjima. Ako je \vec{k}_m talasnji vektor koji je pridružen najnižoj energiji zone, razvijanjem energije u red po stepenima vektora: $\vec{K} = \vec{k} - \vec{k}_m$, i iz uslova ekstrema $(\nabla_{\vec{k}} E)_m = 0$, za energiju elektrona u kvadratnoj aproksimaciji nalazimo:

$$E(\vec{K}) = E(\vec{k}_m) + \frac{1}{2} \left[(\vec{K} \nabla_{\vec{k}})^2 E \right]_m. \quad (2.25)$$

U drugom članu na desnoj strani pojavljuju se komponente tenzora recipročne efektivne mase:

$$\left[(\vec{K} \nabla_{\vec{k}})^2 E \right]_m = \hbar^2 \sum_{\alpha\beta} K_\alpha K_\beta \frac{1}{m_{\alpha\beta}^*}$$

Ako predjemo u sistem glavnih osa, proizvodi različitih komponenata postaju jednaki nuli i u tenzoru ostaju samo dijagonalni elementi:

$$\frac{1}{m^*} = \begin{pmatrix} \frac{1}{m_1^*} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{m_2^*} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{m_3^*} \end{pmatrix}$$

m_1^* , m_2^* , m_3^* - predstavljaju efektivne mase elektrona u smeru glavnih osa kristala.

$$\frac{1}{m_\alpha^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_\alpha^2}; \quad \alpha = 1, 2, 3.$$

Tada izraz za energiju postaje:

$$E(\vec{K}) = E(\vec{k}_m) + \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{K_1^2}{m_1^*} + \frac{K_2^2}{m_2^*} + \frac{K_3^2}{m_3^*} \right) \quad (2.26)$$

Ubrzanje elektrona u pojedinim smerovima zavisi od velicine efektivnih masa m_1^* , m_2^* , m_3^* ; sto je veća efektivna masa, to je manje ubrzanje elektrona, odnosno, teže ih je ubrzavati u tom smeru.

Za kubne sisteme sva tri smera su podjednaka, pa nestaju razlike medju efektivnim masama: $m_1^* = m_2^* = m_3^* = m^*$ i m^* - postaje efektivna masa elektrona pri dnu provodne zone.

Zavisnost energije kubnih kristala od talasnog vektora u okolini \vec{k} -prostora ista je kao i za slobodne elektrone do aditivnog konstantnog člana, tj.

$$E(\vec{K}) = E(\vec{k}_m) + \frac{\hbar^2 K^2}{2m^*} \quad (2.27)$$

Ova relacija se odnosi na okolinu energetskog minimuma, drugi izvod energije i efektivna masa su veći od nule: $m^* > 0$.

Razvijanjem energije u red po stepenima, razmotrimo energetska stanja pri vrhu provodne zone: $\vec{K} = \vec{k} - \vec{k}_M$, \vec{k}_M - je talasni vektor pridružen energetskom maksimumu zone. U aproksimaciji malih talasnih vektora nalazimo:

$$E(\vec{K}) = E(\vec{k}_M) + \frac{\hbar^2}{2} \sum_{\alpha\beta} K_\alpha K_\beta \frac{1}{m_{\alpha\beta}^*}$$

Za slučaj „čistih” kubnih kristala gornji izraz prelazi u:

$$E(\vec{K}) = E(\vec{k}_M) + \frac{\hbar^2 K^2}{2m^*} \quad (2.28)$$

Da bi za $K = 0$ energija bila maksimalna, mora drugi izvod energije po talasnom vektoru biti negativan, tj. efektivna masa postaje manja od nule: $m^* < 0$. U mnogim slučajevima valentna zona će biti skoro potpuno popunjena, a samo mali broj stanja najviših energija će biti prazan.

Prepostavimo, prvo da su sva stanja u valentnoj zoni zauzeta, tada se isti broj elektrona kreće u dva suprotna smera i rezultantna struja iščezava:

$$\vec{j} = -e \sum_{s, \vec{k}} \vec{v}_{\vec{k}} = 0 \quad (2.29)$$

Ako „uklonimo” elektron iz stanja sa talasnim vektorom \vec{k}' pri vrhu zone, prethodni izraz prelazi u:

$$\vec{j}' = -e \sum_{s, \vec{k} \neq \vec{k}'} \vec{v}_{\vec{k}} = e \vec{v}_{\vec{k}'}$$

Prema tome, vidimo da se stanje u zoni može opisati prisustvom kvazičestice koja poseduje isti iznos naelektrisanja kao i elektron, samo suprotnog predznaka. Tim kvazičesticama pripisani su talasni vektori nezauzetih kvantnih stanja, pa ih nazivamo šupljinama. Njihov smer kretanja u spoljašnjem polju je suprotan smeru kretanja elektrona. Promena predznaka naelektrisanja ne utiče na izraz za ubrzanje ako istovremeno promenimo 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.

2.9 Elektronski hamiltonijan

Sada ćemo razmotriti neka svojstva elektronskog podsistema idealnog beskonačnog kristala polazeći od hamiltonijana slobodnih elektrona koji u konfiguracionom prostoru ima oblik:

$$H = \sum_{\vec{n}} \Delta_{\vec{n}} a_{\vec{n}}^+ a_{\vec{n}} - \sum_{\vec{n}, \vec{m}} W_{\vec{n}, \vec{m}} a_{\vec{n}}^+ a_{\vec{m}} \quad (2.30)$$

gde su $a_{\vec{n}}^+$ i $a_{\vec{n}}$ - kreacioni i anihilacioni operatori elektrona na čvoru \vec{n} reštke. Veličina $\Delta_{\vec{n}}$ - predstavlja energiju elektrona lokalizovanog na čvoru \vec{n} , a veličine $W_{\vec{n}, \vec{m}}$ - su matrični elementi elektronskog transfera sa čvora \vec{n} na čvor \vec{m} . 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 (2.30) ekvivalentan hamiltonijanu elektronskog gasa u aproksimaciji efektivne mase:

$$H = \sum_{\vec{k}} E_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}}, \quad E_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2 m^*} \quad (2.31)$$

Iz translacione invarijantnosti posmatranog idealnog kristala sledi periodičnost hamiltonijana (2.30) koja ima za posledicu da su:

$$\Delta_{\vec{n}} = \Delta, \quad W_{\vec{n}, \vec{m}} = W_{\vec{m}, \vec{n}} \equiv W; \quad \forall (\vec{n}, \vec{m}) \quad (2.32)$$

Na osnovu toga, u aproksimaciji najbližih suseda, elektronski hamiltonijan postaje:

$$\begin{aligned} H = & \Delta \sum_{n_x n_y n_z} a_{n_x n_y n_z}^+ a_{n_x n_y n_z} - W \sum_{n_x n_y n_z} a_{n_x n_y n_z}^+ (a_{n_x+1, n_y n_z} + a_{n_x-1, n_y n_z} + \\ & + a_{n_x n_y+1, n_z} + a_{n_x n_y-1, n_z} + a_{n_x n_y n_z+1} + a_{n_x n_y n_z-1}) \end{aligned} \quad (2.33)$$

2.10 Elektronske Grinove funkcije

Svojstva posmatranog elektronskog sistema analiziraćemo pomoću antikomutatorske Grinove funkcije

$$G_{\vec{n}, \vec{m}}(t) = \Theta(t) \langle \{a_{\vec{n}}(t), a_{\vec{m}}^+(0)\} \rangle \quad (2.34)$$

koja zadovoljava jednačinu kretanja:

$$i\hbar \frac{d}{dt} G_{\vec{n}, \vec{m}}(t) = i\hbar \delta_{\vec{n}\vec{m}} \delta(t) + \Theta(t) \langle \{[a_{\vec{n}}, H], a_{\vec{m}}^+\} \rangle \quad (2.35)$$

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

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

Hamiltonian iz relacije (2.33) može se napisati kao zbir:

$$H = H_1 - \sum_{\nu=2}^7 H_{\nu} \quad (2.37)$$

gde su:

$$\begin{aligned} H_1 &= \Delta \sum_{m_x m_y m_z} a_{m_x m_y m_z}^+ a_{m_x m_y m_z}; & H_2 &= W \sum_{m_x m_y m_z} a_{m_x m_y m_z}^+ a_{m_x+1, m_y m_z}; \\ H_3 &= W \sum_{m_x m_y m_z} a_{m_x m_y m_z}^+ a_{m_x-1, m_y m_z}; & H_4 &= W \sum_{m_x m_y m_z} a_{m_x m_y m_z}^+ a_{m_x m_y+1, m_z}; \\ H_5 &= W \sum_{m_x m_y m_z} a_{m_x m_y m_z}^+ a_{m_x m_y-1, m_z}; & H_6 &= W \sum_{m_x m_y m_z} a_{m_x m_y m_z}^+ a_{m_x m_y m_z+1}; \\ H_7 &= W \sum_{m_x m_y m_z} a_{m_x m_y m_z}^+ a_{m_x m_y m_z-1} \end{aligned}$$

Ako u jednačini kretanja (2.35) drugi deo izraza na desnoj strani napišemo kao:

$$\Theta(t) \langle \{[a_{\vec{n}}, H], a_{\vec{m}}^+\} \rangle = F \quad (2.38)$$

a komutator:

$$\hat{C} \equiv \hat{C}_{\vec{n}} \equiv [a_{\vec{n}}, H] = \hat{C}_1 - \sum_{\nu=2}^7 \hat{C}_{\nu} \quad (2.39)$$

tada je:

$$F \equiv F_{\vec{n}\vec{m}} \equiv \Theta(t) \langle \{\hat{C}, a_{\vec{m}}^+\} \rangle = F_1 - \sum_{\nu=2}^7 F_{\nu} \quad (2.40)$$

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

$$\begin{aligned}
 \hat{C}_1 &= [a_{\vec{n}}, H_1] = \Delta \sum_{m_x m_y m_z} [a_{n_x n_y n_z}, a_{m_x m_y m_z}^+ a_{m_x m_y m_z}] = \\
 &= \Delta \sum_{m_x m_y m_z} [a_{m_x m_y m_z}^+ (a_{n_x n_y n_z}, a_{m_x m_y m_z} - a_{m_x m_y m_z} a_{n_x n_y n_z}) + \quad (2.41) \\
 &\quad + (a_{n_x n_y n_z} a_{m_x m_y m_z}^+ - a_{m_x m_y m_z}^+ a_{n_x n_y n_z}) a_{m_x m_y m_z}]
 \end{aligned}$$

Na osnovu relacije (2.36) sledi: $a_{n_x n_y n_z} a_{m_x m_y m_z} = -a_{n_x n_y n_z} a_{m_x m_y m_z}$, 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:

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

Poznato je da $\delta_{\vec{n}\vec{m}}$ „skida“ sumu 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:

$$\hat{C}_1 = \Delta a_{n_x n_y n_z}$$

Analognim računanjem kao za \hat{C}_1 ostale vrednosti komutatora \hat{C}_ν će biti:

$$\begin{aligned}
 \hat{C}_2 &= W a_{n_x+1, n_y n_z} ; \quad \hat{C}_3 = W a_{n_x-1, n_y n_z} \\
 \hat{C}_4 &= W a_{n_x n_y+1, n_z} ; \quad \hat{C}_5 = W a_{n_x n_y-1, n_z} \\
 \hat{C}_6 &= W a_{n_x n_y n_z+1} ; \quad \hat{C}_7 = W a_{n_x n_y n_z-1}
 \end{aligned}$$

Pomoću izračunatih komutatora mogu se napisati izrazi za svako F_ν iz jednačine (2.40):

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

gde izraz: $\Theta(t) \langle a_{\vec{n}}, a_{\vec{m}}^+ \rangle$ predstavlja Grinovu funkciju $G_{\vec{n}\vec{m}}(t)$, pa na osnovu toga dalje sledi:

$$\begin{aligned}
 F_2 &= W G_{n_x+1, n_y n_z; \vec{m}} ; \quad F_3 = W G_{n_x-1, n_y n_z; \vec{m}} \\
 F_4 &= W G_{n_x n_y+1, n_z; \vec{m}} ; \quad F_5 = W G_{n_x n_y-1, n_z; \vec{m}} \\
 F_6 &= W G_{n_x n_y n_z+1; \vec{m}} ; \quad F_7 = W G_{n_x n_y n_z-1; \vec{m}}
 \end{aligned}$$

Ako se izračunate vrednosti za F_ν zamene u jednačinu kretanja (2.35) dobija se:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} G_{\vec{n},\vec{m}}(t) &= i\hbar \delta_{\vec{n}\vec{m}} \delta(t) + \Delta G_{\vec{n},\vec{m}}(t) - \\ &- W \left[G_{n_x+1,n_y n_z;\vec{m}}(t) + G_{n_x-1,n_y n_z;\vec{m}}(t) + G_{n_x n_y+1,n_z;\vec{m}}(t) + \right. \\ &\left. + G_{n_x n_y-1,n_z;\vec{m}}(t) + G_{n_x n_y n_z+1;\vec{m}}(t) + G_{n_x n_y n_z-1;\vec{m}}(t) \right] \end{aligned} \quad (2.42)$$

Pošto se radi o beskonačnoj strukturi, moguće je izvršiti potpuni Furije transform Grinovih funkcija:

$$G_{\vec{n},\vec{m}}(t) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega G_{\vec{k}}(\omega) e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})-i\omega t} \quad (2.43)$$

gde je $N \equiv N_x N_y N_z$; $a_x = a_y = a_z = a$, pa sledi:

$$\vec{k}(\vec{n} - \vec{m}) = a [k_x(n_x - m_x) + k_y(n_y - m_y) + k_z(n_z - m_z)]$$

Na osnovu toga biće:

$$\begin{aligned} G_{n_x \pm 1, n_y n_z; \vec{m}}(t) &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega t} e^{ia[k_x(n_x \pm 1 - m_x) + k_y(n_y - m_y) + k_z(n_z - m_z)]} G_{\vec{k}}(\omega) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega G_{\vec{k}}(\omega) e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})-i\omega t} e^{\pm iak_x} \end{aligned} \quad (2.44)$$

Na sličan način dobija se da je:

$$G_{n_x n_y \pm 1, n_z; \vec{m}}(t) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega G_{\vec{k}}(\omega) e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})-i\omega t} e^{\pm iak_y} \quad (2.45)$$

$$G_{n_x n_y n_z \pm 1; \vec{m}}(t) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega G_{\vec{k}}(\omega) e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})-i\omega t} e^{\pm iak_z} \quad (2.46)$$

Ako se još izvrše Furije transformacije Kronekerovih simbola i delta funkcije:

$$\delta_{\vec{n}\vec{m}} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})}; \quad \delta(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega t} \quad (2.47)$$

i izraz (2.43) diferencira po t:

$$\frac{d}{dt} G_{\vec{n},\vec{m}}(t) = -i \frac{\omega}{N} \sum_{\vec{k}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega G_{\vec{k}}(\omega) e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})-i\omega t} \quad (2.48)$$

a zatim jednačine (2.44-48) zamene u jednačinu (2.42) dobija se:

$$\frac{1}{2\pi N} \sum_{\vec{k}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})-i\omega t} \left\{ -i\hbar + 2\pi [\hbar\omega - \Delta + W (e^{+iak_x} + e^{-iak_x}) + W (e^{+iak_y} + e^{-iak_y} + e^{+iak_z} + e^{-iak_z})] G_{\vec{k}}(\omega) \right\} = 0 \quad (2.49)$$

Koristeći izraze:

$$e^{+iak_j} + e^{-iak_j} = 2 \cos ak_j ; \quad j = x, y, z$$

izraz (2.49) postaje:

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

deljenjem prethodne jednačine sa \hbar se dobija:

$$G_{\vec{k}}(\omega) = \frac{i}{2\pi} \frac{1}{\omega - \omega_{\vec{k}}} \quad (2.50)$$

gde je:

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

i predstavlja realni deo pola Grinove funkcije.

2.11 Elektronski spektri i efektivna masa

Poslednji izraz, kao što smo u Dodatku I pomenuli, definiše energije elementarnih pobudjenja:

$$E_{\vec{k}} = \hbar \omega_{\vec{k}} = \Delta - 2W (\cos ak_x + \cos ak_y + \cos ak_z) \quad (2.51)$$

koji predstavlja zakon disperzije jako vezanih elektrona. U slučaju slabo vezanih elektrona (degenerisan elektronski gas), $\Delta = 6W$ pa je:

$$E_{\vec{k}} = 2W (3 - \cos ak_x - \cos ak_y - \cos ak_z)$$

gde je: $1 - \cos ak_j = 2 \sin^2 \frac{ak_j}{2}$, pa se dobija:

$$E_{\vec{k}} = 4W \left(\sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y}{2} + \sin^2 \frac{ak_z}{2} \right) \quad (2.52)$$

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 izraz (2.52) dobija oblik:

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

Na osnovu (2.24) sledi: $Wa^2 k^2 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$ odnosno:

$$m^* = \frac{\hbar^2}{2a^2 W} \quad (2.53)$$

Poslednji izraz predstavlja efektivnu masu u dugotalasnoj aproksimaciji. Recipročna vrednost biće: $\frac{1}{m^*} = \frac{2a^2 W}{\hbar^2}$, što zbog tensorskog karaktera efektivne mase možemo pisati:

$$\frac{1}{m^*} = \frac{2a^2 W}{\hbar^2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.54)$$

3. ELEKTRONI U TANKIM FILMOVIMA

Hamiltonian jako vezanih elektrona u tankim kristalnim filmovima možemo formirati polazeći od „balkovskog” hamiltonijana koji u aproksimaciji najbližih suseda ima oblik:

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

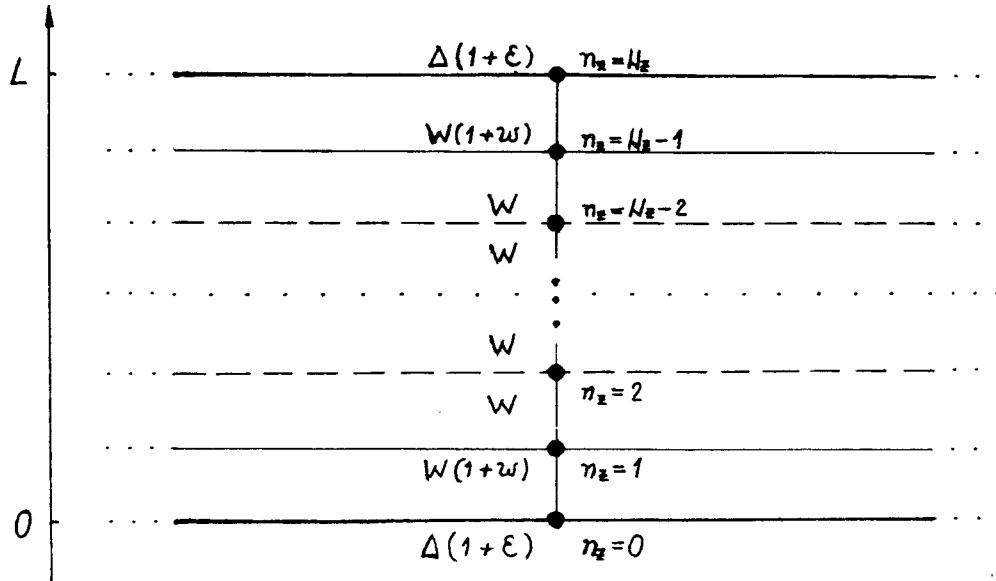
Fermionski operatori $a_{\vec{n}}^+$ i $a_{\vec{n}}$, kreiraju i anihiliraju elektrone na atomu čiji je položaj određen vektorom rešetke $\vec{n} = n_x \vec{i} + n_y \vec{j} + n_z \vec{k}$. Pošto su granične površine filma uzete normalno na z - pravac, indeks sloja n_z u (3.1) - uzima vrednosti

$$n_z = 0, 1, 2, \dots, N_z \quad (3.2)$$

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 (od $-\infty$, do $+\infty$).

Realni kristali za razliku od idealnih beskonačnih struktura, ne poseduju osobinu translacijske invarijantnosti. Postojanje izvesnih graničnih uslova, jedan je od uzroka narušenja simetrije. Sistemi koji imaju dve paralelne granične površine nazivaju se filmovima.

Posmatra se idealni tanki film kubne kristalne strukture, načinjen na substratu nekim tehničko-tehnološkim postupkom (naparavanjem, spaterovanjem i sl.). Pojam idealni film koristi se u smislu nenarušenja kristalne strukture (bez prisustva defekata, primesa i sl.), a ne u smislu prostorne neograničenosti. Dimenzije filma su takve da je on u XY ravnima beskonačan, a u z pravcima ima konačnu debljinu (L). Znači da ovaj film poseduje dve beskonačne granične površine paralelne XY ravnima i to za: $z = 0$ i $z = L$.



Slika 4.1: Presek kristalnog uzorka u $X(Y)Z$ - ravni

Zbog izmenjenih uslova na granicama filma, promena periodičnog potencijala kristalne rešetke, uzećemo da je energija elektrona oblika:

$$\Delta_{n_x n_y 0} = \Delta_{n_x n_y N_z} \equiv \Delta (1 + \varepsilon) \quad (3.3)$$

gde je Δ - energija elektrona na čvoru kod beskonačnog kristala. Površinski parametar ε (koji može biti i > 0 i < 0) izražava relativnu promenu ove energije na granicama filma.

Matrične elemente elektronskog preskoka sa sloja na sloj, možemo izraziti:

$$\begin{aligned} W_{n_x n_y 0; n_x n_y 1} &= W_{n_x n_y N_z - 1; n_x n_y N_z} = W(1 + w) \\ W_{n_x n_y 0; n_x n_y -1} &= W_{n_x n_y N_z; n_x n_y N_z + 1} = 0 \end{aligned}$$

pri čemu je za svaki sloj,

$$W_{n_x n_y n_z; n_x \pm 1, n_y n_z} = W_{n_x n_y n_z; n_x n_y \pm 1, n_z} \equiv W$$

gde je W - konstanta elektronskog transvera idealnog kristala. Drugi površinski parametar w ; ($w > 0$ ili $w < 0$) - opisuje relativnu promenu matričnog elementa elektronskog transvera (W) izmedju graničnih i njima susednih slojeva filma.

Elektronski hamiltonijan tankih kristalnih filmova možemo napisati u obliku:

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

gde je:

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

$$\begin{aligned} H_p &= \sum_{m_x m_y} \left\{ a_{m_x m_y 0}^+ \left[(1 + \varepsilon) \Delta a_{m_x m_y 0} - W(1 + w) a_{m_x m_y 1} \right] + \right. \\ &\quad + a_{m_x m_y N_z}^+ \left[(1 + \varepsilon) \Delta a_{m_x m_y N_z} - W(1 + w) a_{m_x m_y N_z-1} \right] - \\ &\quad - W a_{m_x m_y 0}^+ \left(a_{m_x+1, m_y 0} + a_{m_x-1, m_y 0} + a_{m_x m_y+1, 0} + a_{m_x m_y-1, 0} \right) - \\ &\quad \left. - W a_{m_x m_y N_z}^+ \left(a_{m_x+1, m_y N_z} + a_{m_x-1, m_y N_z} + a_{m_x m_y+1, N_z} + a_{m_x m_y-1, N_z} \right) \right\} \end{aligned} \quad (3.6)$$

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

$$G_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z}(t) = \Theta(t) \langle \{ a_{n_x n_y n_z}(t), a_{m_x m_y m_z}^+(0) \} \rangle \quad (3.7)$$

koje određuju ravnotežna svojstva elektrona u tankim kristalnim filmovima.

Elektronske Grinove funkcije se mogu izračunati mikroteorijskom procedurom na sličan način kao što je urađeno u glavi 2. Potrebno je pre svega formirati jednačine kretanja diferenciranjem prethodnog izraza po vremenu:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} G_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z}(t) &= i\hbar \delta(t) \delta_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z} + \\ &\quad + \Theta(t) \langle \{ [a_{n_x n_y n_z}(t), H], a_{m_x m_y m_z}^+(0) \} \rangle \end{aligned} \quad (3.8)$$

Najpre ćemo računati komutatore:

$$\hat{C}_{\vec{n}} = [a_{\vec{n}}, H]$$

H_z pišemo kao sumu:

$$H_z = H_1 - \sum_{\nu=2}^7 H_{\nu}$$

gde su:

$$\begin{aligned} H_1 &= \Delta \sum_{m_x m_y} \sum_{m_z=1}^{N_z-1} a_{m_x m_y m_z}^+ a_{m_x m_y m_z} \\ H_2 &= W \sum_{m_x m_y} \sum_{m_z=1}^{N_z-1} a_{m_x m_y m_z}^+ a_{m_x+1, m_y m_z} \\ H_3 &= W \sum_{m_x m_y} \sum_{m_z=1}^{N_z-1} a_{m_x m_y m_z}^+ a_{m_x-1, m_y m_z} \\ H_4 &= W \sum_{m_x m_y} \sum_{m_z=1}^{N_z-1} a_{m_x m_y m_z}^+ a_{m_x m_y+1, m_z} \\ H_5 &= W \sum_{m_x m_y} \sum_{m_z=1}^{N_z-1} a_{m_x m_y m_z}^+ a_{m_x m_y-1, m_z} \\ H_6 &= W \sum_{m_x m_y} \sum_{m_z=1}^{N_z-1} a_{m_x m_y m_z}^+ a_{m_x m_y m_z+1} \\ H_7 &= W \sum_{m_x m_y} \sum_{m_z=1}^{N_z-1} a_{m_x m_y m_z}^+ a_{m_x m_y m_z-1} \end{aligned}$$

Za komutatore pišemo:

$$\hat{C}_{\vec{n}} = \hat{C}_1 - \sum_{\nu=2}^7 \hat{C}_{\nu}$$

gde je:

$$\hat{C}_1 = [a_{\vec{n}}, H_1] = \Delta \sum_{m_x m_y} \sum_{m_z=1}^{N_z-1} [a_{n_x n_y n_z}; a_{m_x m_y m_z}^+ a_{m_x m_y m_z}]$$

Na osnovu komutacionih relacija (2.36) i istog računskog postupka primenjenog u prethodnoj glavi, dobija se:

$$\begin{aligned} \hat{C}_1 &= \Delta a_{n_x n_y n_z} \\ \hat{C}_2 &= [a_{\vec{n}}, H_2] = W a_{n_x+1, n_y n_z}; \quad \hat{C}_3 = [a_{\vec{n}}, H_3] = W a_{n_x-1, n_y n_z} \\ \hat{C}_4 &= [a_{\vec{n}}, H_4] = W a_{n_x n_y+1, n_z}; \quad \hat{C}_5 = [a_{\vec{n}}, H_5] = W a_{n_x n_y-1, n_z} \\ \hat{C}_6 &= [a_{\vec{n}}, H_6] = W a_{n_x n_y n_z+1}; \quad \hat{C}_7 = [a_{\vec{n}}, H_7] = W a_{n_x n_y n_z-1} \end{aligned}$$

Predstavimo sada veličinu F kao:

$$F = \Theta(t) \langle \{[a_{\vec{n}}(t), H], a_{\vec{m}}^+\} \rangle = \Theta(t) \langle \{\hat{C}_n, a_{\vec{m}}^+\} \rangle = F_1 - \sum_{\nu=2}^7 F_{\nu}$$

Primenjujući račun za F_{ν} iz prethodne glave, dobija se:

$$\begin{aligned} F_1 &= \Delta G_{n_x n_y n_z; \vec{m}} \\ F_2 &= W G_{n_x+1 n_y n_z; \vec{m}}; \quad F_3 = W G_{n_x-1 n_y n_z; \vec{m}} \\ F_4 &= W G_{n_x n_y+1 n_z; \vec{m}}; \quad F_5 = W G_{n_x n_y-1 n_z; \vec{m}} \\ F_6 &= W G_{n_x n_y n_z+1; \vec{m}}; \quad F_7 = W G_{n_x n_y n_z-1; \vec{m}} \end{aligned}$$

Ako ovako dobijene vrednosti za F_{ν} zamenimo u jednačinu kretanja (3.8), uzimajući u obzir samo H_z (uz uslov $1 \leq n_z \leq N_z - 1$), dobijamo:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} G_{\vec{n},\vec{m}}(t) &= i\hbar \delta_{\vec{n}\vec{m}} \delta(t) + \Delta G_{\vec{n},\vec{m}}(t) - \\ &- W \left[G_{n_x+1,n_y n_z;\vec{m}}(t) + G_{n_x-1,n_y n_z;\vec{m}}(t) + G_{n_x n_y+1,n_z;\vec{m}}(t) + \right. \\ &\left. + G_{n_x n_y-1,n_z;\vec{m}}(t) + G_{n_x n_y n_z+1;\vec{m}}(t) + G_{n_x n_y n_z-1;\vec{m}}(t) \right] \end{aligned} \quad (3.9)$$

Uvodjenjem Furije-transformacij za Grinovu funkciju, u opštem slučaju dobijamo:

$$G_{n_x n_y n_z; \vec{m}}(t) = \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i[k_x a_x(n_x - m_x) + k_y a_y(n_y - m_y)]} e^{-i\omega t} G_{n_z; m_z}(k_x, k_y; \omega) \quad (3.10)$$

gde je: $n_z = 0, 1, 2, \dots N_z$ i $a_x = a_y = a$. // Furije-transformacije delta funkcija su:

$$\delta(t) = \frac{1}{2\pi} \int d\omega e^{-i\omega t} \quad (3.11)$$

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

Zamenom gornjih transformacija u jednačinu (3.9) dobija se:

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

odnosno:

$$[\hbar\omega - \Delta + 2W(\cos ak_x + \cos ak_y)] G_{n_z; m_z}(k_x k_y; \omega) + \\ - W [G_{n_z+1; m_z}(k_x k_y; \omega) + G_{n_z-1; m_z}(k_x k_y; \omega)] = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{n_z m_z} \quad (3.12)$$

Jednačina (3.12) data je za slučaj $1 \leq n_z \leq N_z - 1$.

Površinski hamiltonijan (3.6) važi za: $0 < n_z < N_z$ i možemo ga pisati kao:

$$H_p = H_8 - H_9 + H_{10} - \sum_{\nu=11}^{19} H_\nu$$

gde su:

$$\begin{aligned}
 H_8 &= (1 + \varepsilon) \Delta \sum_{m_x m_y} a_{m_x m_y 0}^+ a_{m_x m_y 0} \\
 H_9 &= (1 + w) W \sum_{m_x m_y} a_{m_x m_y 0}^+ a_{m_x m_y 1} \\
 H_{10} &= (1 + \varepsilon) \Delta \sum_{m_x m_y} a_{m_x m_y N_z}^+ a_{m_x m_y N_z} \\
 H_{11} &= (1 + w) W \sum_{m_x m_y} a_{m_x m_y N_z}^+ a_{m_x m_y N_z - 1} \\
 H_{12} &= W \sum_{m_x m_y} a_{m_x m_y 0}^+ a_{m_x + 1, m_y 0} ; \quad H_{13} = W \sum_{m_x m_y} a_{m_x m_y 0}^+ a_{m_x - 1, m_y 0} \\
 H_{14} &= W \sum_{m_x m_y} a_{m_x m_y 0}^+ a_{m_x m_y + 1, 0} ; \quad H_{15} = W \sum_{m_x m_y} a_{m_x m_y 0}^+ a_{m_x m_y - 1, 0} \\
 H_{16} &= W \sum_{m_x m_y} a_{m_x m_y N_z}^+ a_{m_x + 1, m_y N_z} ; \quad H_{17} = W \sum_{m_x m_y} a_{m_x m_y N_z}^+ a_{m_x - 1, m_y N_z} \\
 H_{18} &= W \sum_{m_x m_y} a_{m_x m_y N_z}^+ a_{m_x m_y + 1, N_z} ; \quad H_{19} = W \sum_{m_x m_y} a_{m_x m_y N_z}^+ a_{m_x m_y - 1, N_z}
 \end{aligned}$$

U ovom slučaju komutatori su:

$$\begin{aligned}
 \hat{C}_8 &= (1 + \varepsilon) \Delta a_{n_x n_y 0} ; & \hat{C}_9 &= W(1 + w) a_{n_x n_y 1} \\
 \hat{C}_{10} &= (1 + \varepsilon) \Delta a_{n_x n_y N_z} ; & \hat{C}_{11} &= W(1 + w) a_{n_x n_y N_z - 1} \\
 \hat{C}_{12} &= W a_{n_x + 1, n_y 0} ; & \hat{C}_{13} &= W a_{n_x - 1, n_y 0} \\
 \hat{C}_{14} &= W a_{n_x n_y + 1, 0} ; & \hat{C}_{15} &= W a_{n_x n_y - 1, 0} \\
 \hat{C}_{16} &= W a_{n_x + 1, n_y N_z} ; & \hat{C}_{17} &= W a_{n_x - 1, n_y N_z} \\
 \hat{C}_{18} &= W a_{n_x n_y + 1, N_z} ; & \hat{C}_{19} &= W a_{n_x n_y - 1, N_z}
 \end{aligned}$$

a njima odgovarajuće funkcije F su:

$$\begin{aligned}
 F_8 &= (1 + \varepsilon) \Delta G_{n_x n_y 0; \vec{m}} ; & F_9 &= (1 + w) W G_{n_x n_y 1; \vec{m}} \\
 F_{10} &= (1 + \varepsilon) \Delta G_{n_x n_y N_z; \vec{m}} ; & F_{11} &= (1 + w) W G_{n_x n_y N_z - 1; \vec{m}} \\
 F_{12} &= W G_{n_x + 1, n_y 0; \vec{m}} ; & F_{13} &= W G_{n_x - 1, n_y 0; \vec{m}} \\
 F_{14} &= W G_{n_x n_y + 1, 0; \vec{m}} ; & F_{15} &= W G_{n_x n_y - 1, 0; \vec{m}} \\
 F_{16} &= W G_{n_x + 1, n_y N_z; \vec{m}} ; & F_{17} &= W G_{n_x - 1, n_y N_z; \vec{m}} \\
 F_{18} &= W G_{n_x n_y + 1, N_z; \vec{m}} ; & F_{19} &= W G_{n_x n_y - 1, N_z; \vec{m}}
 \end{aligned}$$

Sada ćemo ove vrednosti za F_ν zameniti u jednačinu kretanja (3.8), ali ovoga puta, uzimajući u obzir samo vrednosti hamiltonijana H_p (za slučaj $0 < n_z < N_z$). Najpre razmatramo granični slučaj $n_z = 0$, za koji jednačina kretanja glasi:

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{d}{dt} G_{n_x n_y 0; \vec{m}}(t) &= i\hbar \delta_{n_x m_x} \delta_{n_y m_y} \delta_{0, m_z} \delta(t) + \\
 &+ (1 + \varepsilon) \Delta G_{n_x n_y 0; \vec{m}}(t) - (1 + w) W G_{n_x n_y 1; \vec{m}} - \\
 &- W [G_{n_x + 1, n_y 0; \vec{m}}(t) + G_{n_x - 1, n_y 0; \vec{m}}(t) + G_{n_x n_y + 1, 0; \vec{m}}(t) + G_{n_x n_y - 1, 0; \vec{m}}(t)]
 \end{aligned} \tag{3.13}$$

Računanje ove jednačine pojednostavljuje se uvodjenjem Furije-transformacija (3.10 i 3.11), uz uslov $n_z = 0$.

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

odnosno:

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - (1 + \varepsilon)\Delta + 2W(\cos ak_x + \cos ak_y)] G_{0;m_z}(k_x k_y; \omega) + \\ & + (1 + w)WG_{1;m_z}(k_x k_y; \omega) = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{0,m_z} \end{aligned} \quad (3.14)$$

Za slučaj $n_z = 1$, jednačina kretanja biće:

$$\begin{aligned} & i\hbar \frac{d}{dt} G_{n_x n_y 1; \vec{m}}(t) = i\hbar \delta_{n_x m_x} \delta_{n_y m_y} \delta_{1m_z} \delta(t) + \Delta G_{n_x n_y 1; \vec{m}}(t) - \\ & - (1 + w)WG_{n_x n_y 0; \vec{m}} - W[G_{n_x+1, n_y 1; \vec{m}}(t) + G_{n_x-1, n_y 1; \vec{m}}(t) + \\ & + G_{n_x n_y +1, 1; \vec{m}}(t) + G_{n_x n_y -1, 1; \vec{m}}(t) + G_{n_x n_y 2; \vec{m}}(t)] \end{aligned} \quad (3.15)$$

Analognim postupkom kao u prethodnom slučaju preko Furije-transformacija dobija se:

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - \Delta + 2W(\cos ak_x + \cos ak_y)] G_{1;m_z}(k_x k_y; \omega) + \\ & + W[G_{2;m_z}(k_x k_y; \omega) + (1 + w)G_{0;m_z}(k_x k_y; \omega)] = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{1,m_z} \end{aligned} \quad (3.16)$$

Za slučaj $n_z = N_z - 1$, istim računom dobija se:

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - \Delta + 2W(\cos ak_x + \cos ak_y)] G_{N_z-1;m_z}(k_x k_y; \omega) + \\ & + W[G_{N_z-2;m_z}(k_x k_y; \omega) + (1 + w)G_{N_z;m_z}(k_x k_y; \omega)] = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{N_z-1,m_z} \end{aligned} \quad (3.17)$$

Za slučaj $n_z = N_z$, jednačina kretanja je:

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

Zamenom Furije-transformacija u prethodnu jednačinu, dobija se:

$$\begin{aligned}
 [\hbar\omega - (1 + \varepsilon)\Delta + 2W(\cos ak_x + \cos ak_y)] G_{N_z; m_z}(k_x k_y; \omega) + \\
 + (1 + w) W G_{N_z-1; m_z}(k_x k_y; \omega) = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{N_z m_z}
 \end{aligned} \tag{3.18}$$

Sada možemo formirati sistem od jednačina (3.12), (3.14) i (3.16-18). Svaku od ovih jednačina delimo sa W , pri čemu uvodimo oznake:

$$\begin{aligned}
 \varrho &= \hbar \frac{\omega}{W} - \frac{\Delta}{W} + 2(\cos ak_x + \cos ak_y) : \\
 G_{n_z; m_z}(k_x, k_y; \omega) &\equiv G_{n_z, m_z}; \quad \mathcal{K} = \frac{i\hbar}{2\pi W}
 \end{aligned} \tag{3.19}$$

Pomenuti sistem jednačina ima oblik:

$$\begin{aligned}
 (\varrho - \varepsilon) G_{0, m_z} + (1 + w) G_{1, m_z} &= \mathcal{K} \delta_{0, m_z} \\
 (1 + w) G_{0, m_z} + \varrho G_{1, m_z} + G_{2, m_z} &= \mathcal{K} \delta_{1, m_z} \\
 G_{1, m_z} + \varrho G_{2, m_z} + G_{3, m_z} &= \mathcal{K} \delta_{2, m_z}
 \end{aligned}$$

$$G_{n_z-1, m_z} + \varrho G_{n_z, m_z} + G_{n_z+1, m_z} = \mathcal{K} \delta_{n_z, m_z} \tag{3.20}$$

$$\begin{aligned}
 G_{N_z-3, m_z} + \varrho G_{N_z-2, m_z} + G_{N_z-1, m_z} &= \mathcal{K} \delta_{N_z-2, m_z} \\
 G_{N_z-2, m_z} + \varrho G_{N_z-1, m_z} + (1 + w) G_{N_z, m_z} &= \mathcal{K} \delta_{N_z-1, m_z} \\
 (1 + w) G_{N_z-1, m_z} + (\varrho - \varepsilon) G_{N_z, m_z} &= \mathcal{K} \delta_{N_z, m_z}
 \end{aligned}$$

Sistem sadrži $N_z + 1$ nepoznatih: $G_{0;m_z}$, $G_{1;m_z}$, $G_{2;m_z}$, ..., $G_{N_z;m_z}$, gde je:

$$G_{n_z;m_z} = \frac{D_{n_z}}{D_{N_z+1}}$$

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

$$D_{N_z+1} \equiv 0 \quad (3.21)$$

$$D_{N_z+1}(\varrho) = \begin{vmatrix} \varrho - \varepsilon & 1+w & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1+w & \varrho & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \varrho & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & \varrho & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & \varrho & 1+w \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1+w & \varrho - \varepsilon \end{vmatrix}_{N_z+1} \quad (3.22)$$

$D_{N_z+1}(\varrho)$ predstavlja determinantu sistema i može se izraziti pomoću karakterističnih Čebiševljevih polinoma (o njima će biti više reči u Dodatku II), višestrukim razvijanjem po prvim i zadnjim vrstama i kolonama:

$$\begin{aligned} D_{N_z+1}(\varrho) &= (\varrho - \varepsilon)^2 C_{N_z-1}(\varrho) - \\ &- 2(\varrho - \varepsilon)(1+w)^2 C_{N_z-2}(\varrho) + (1+w)^4 C_{N_z-3}(\varrho) \end{aligned} \quad (3.23)$$

Uvodjenjem relacija:

$$C_{N_z-1} = \varrho C_{N_z} - C_{N_z+1}; \quad C_{N_z-2} = \varrho C_{N_z-1} - C_{N_z}$$

$$C_{N_z-3} = \varrho C_{N_z-2} - C_{N_z-1}$$

izraz (3.23) prelazi u:

$$\begin{aligned} D_{N_z+1}(\varrho) &= [\varrho(\varrho - \varepsilon)^2 + 2(1+w)^2(\varrho - \varepsilon)(1 - \varrho^2) + \\ &+ (1+w)^4 \varrho(\varrho^2 - 2)] C_{N_z}(\varrho) - \\ &- \left\{ [(\varrho - \varepsilon) - \varrho(1+w)^2]^2 - (1+w)^4 \right\} C_{N_z+1}(\varrho) \end{aligned} \quad (3.24)$$

Uslov (3.21), u opštem slučaju, može se rešiti numerički za zadate parametre ε, w i N_z , ali i analitički kada je: $\varepsilon = w = 0$. Drugi slučaj odgovara film-strukturi koja je „isečena” iz beskonačne. Tada (kao što je u Dodatku II pokazano) je:

$$D_{N_z+1}(\varrho) = C_{N_z+1}(\zeta) = \frac{\sin(N_z + 1)\zeta}{\sin \zeta}; \quad \varrho = 2 \cos \zeta$$

Iz uslova $C_{N_z+1} \equiv 0$, dobija se:

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

Na osnovu ovoga i jednačine (3.19) nalazimo:

$$\hbar \omega_\mu = \Delta - 2W (\cos ak_x + \cos ak_y - \cos \zeta_\mu) \quad (3.25)$$

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

$$k_z(\nu) = \frac{\pi}{a} \frac{\nu}{N_z + 2}; \quad \nu = 1, 2, 3, \dots, N_z + 1 \quad (3.26)$$

Zamenom ovih relacija u (3.25) i uzimajući u obzir da je $E_{\vec{k}}(\nu) = \hbar\omega_\nu$ i $\Delta = 6W$, sledi:

$$E_{\vec{k}}(\nu) = 4 W \left[\sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y}{2} + \sin^2 \frac{ak_z(\nu)}{2} \right] \quad (3.27)$$

Izraz (3.27) predstavlja zakon disperzije slabo vezanih elektrona u filmu i ima istu formu kao izraz (2.52) dobijen za idealne neograničene strukture, s razlikom što je tamo k_z praktično kontinualno promenljivo (u intervalu $[0, \pi/a]$) kao što su k_x i k_y , a ovde je diskretno - dato izrazom (3.26).

Pored toga, uočava se da je:

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

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

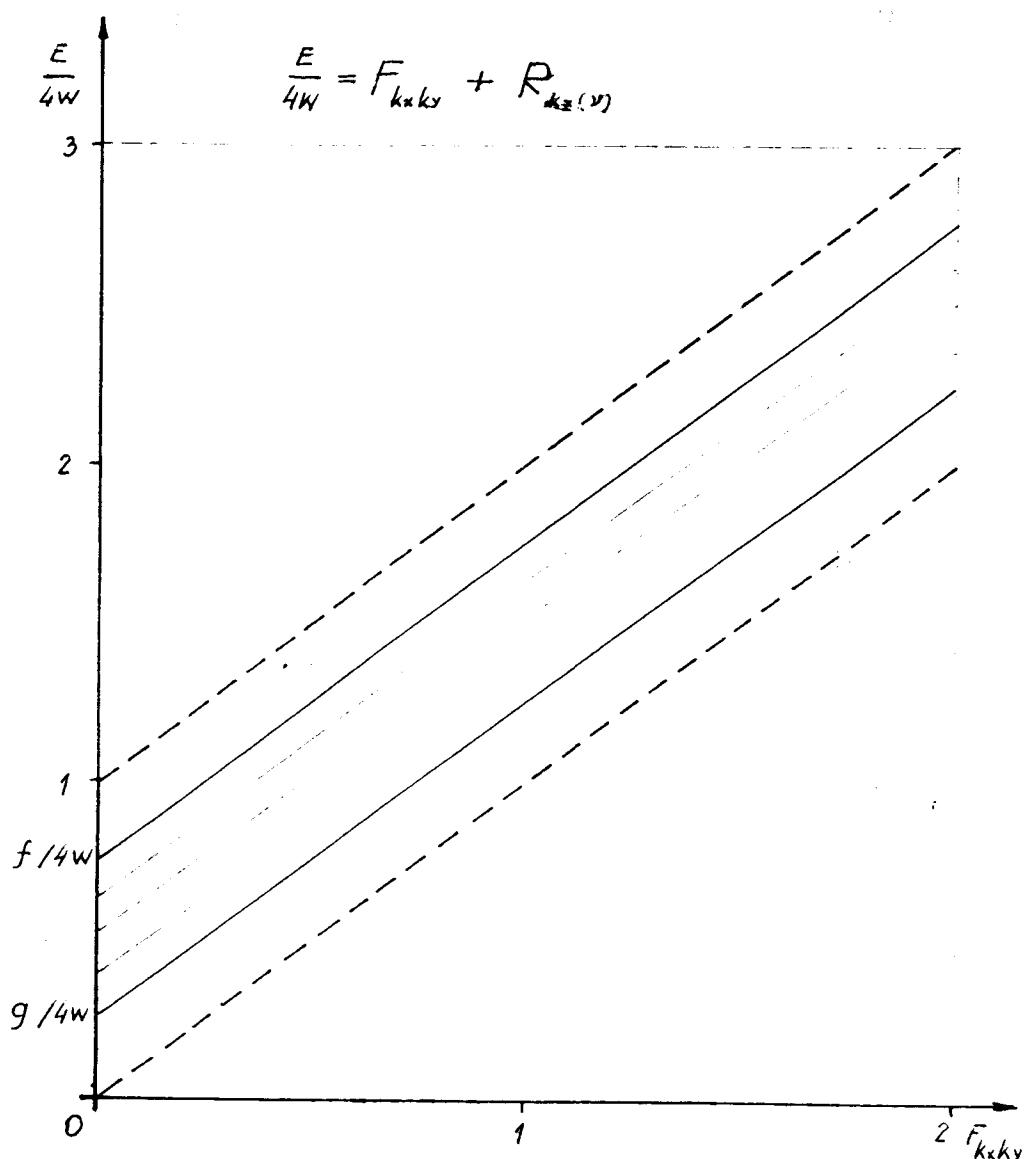
$$k_x^{max} = k_y^{max} = \frac{\pi}{a}; \quad k_z^{max} = \frac{\pi}{a} \frac{N_z + 1}{N_z + 2} < \frac{\pi}{a}$$

Izmedju minimalne i maksimalne vrednosti za k_z , pa prema tome i za $E(\vec{k})$, 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, donji g i gornji f :

$$g = E_f^{min} - E_b^{min} = W \left(\frac{\pi}{N_z + 2} \right)^2 \equiv E_b^{max} - E_f^{max} = f \quad (3.28)$$

(indeks f označava film, a b beskonačnu strukturu).

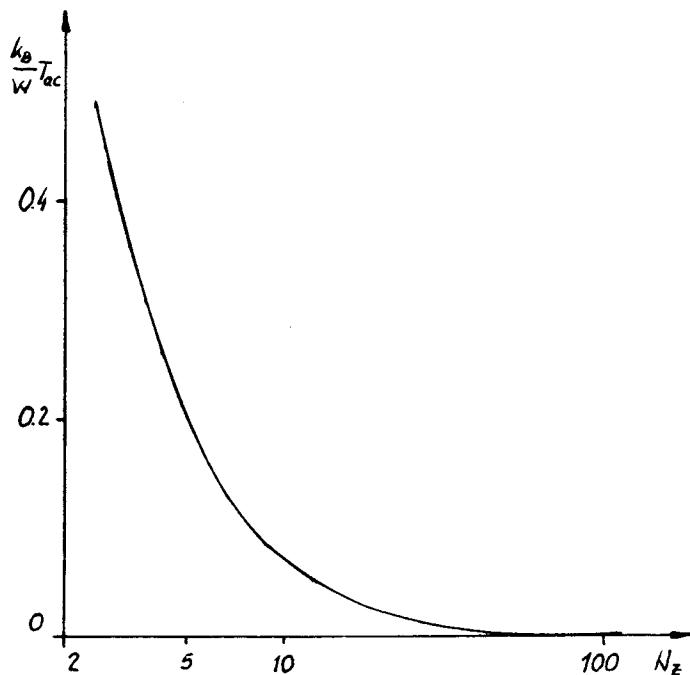


Slika 4.2 : Zakon disperzije elektrona (elektronskog gasa) u filmu

Izmedju isprekidanih linija prikazana je zona kontinualnih dozvoljenih energija elektrona u idealnim (neograničenim) strukturama, dok su punim linijama označene diskretne vrednosti elektronskih energija u filmu.

Uzimajući u obzir jednačinu (3.28) možemo odrediti aktivacionu temperaturu elektrona u filmu:

$$T_{ac} = \frac{g}{k_B} = \frac{W}{k_B} \left(\frac{\pi}{N_z + 2} \right)^2 \quad (3.29)$$



Slika 4.3: Ponašanje aktivacione temperature u zavisnosti od broja slojeva duž z pravca (debljine filma)

Sa slike se vidi da aktivaciona temperatura 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.

U skladu sa jednačinom (3.29) i energetski gepovi se ponašaju na isti način kao i sama aktivaciona temperatura. Sada možemo izvršiti procenu veličine aktivacione temperature za zadatu vrednost fenomenološkog parametra $W \sim 1$ eV i stotinak kristalnih ravni u z pravcu: $T_{ac} \sim 10$ K.

Na osnovu izraza za tenzor efektivne mase elektrona (2.23) i izraza (3.27) sledi da se za efektivnu masu elektrona u film strukturama dobija ista zavisnost kao i za beskonačne strukture (2.54). Ta činjenica dovodi do zaključka da je efektivna masa elektrona ista u oba posmatrana sistema i da karakter elementarnih nosilaca nanelektrisanja, prisustvom granica, nije izmenjen.

4. Z A K L J U Č A K

U radu su istraženi i analizirani energetski spektri i moguća stanja elektrona u kristalnim, idealnim beskonačnim i film strukturama, sa primitivnom kubnom rešetkom, na osnovu čega se došlo do važnih činjenica:

1. Rezultati ovih analiza pokazuju bitne razlike u zakonu disperzije elektrona u pomenuta dva sistema, kao isključive posledice postojanja granica film struktura, u kojima elektronski spektri poseduju energetski gep.

U odnosu na zonu dozvoljenih energija idealnih struktura sa praktično kontinualnim rasporedom, zona elektronskih dozvoljenih energija u filmu je uža za iznos $2g$ i diskretna. Veličina gepa zavisi od debljine filma i veoma brzo opada sa njenim povećanjem. Na isti način zavisi i povećava se broj diskretnih stanja unutar zone dozvoljenih energija filma.

2. Efektivna masa elektrona u filmu i beskonačnim strukturama ostaje nepromenjena, što znači da se karakter i stanja nosioca nanelektrisanja ne menjaju.

3. Posledica postojanja donjeg energetskog gepa je pojava elektronske aktivacione temperature. Ovo može da se tumači na sledeći način: aktivaciona temperatura odgovara energiji osnovnog stanja elektronskog sistema, a ona, u stvari, predstavlja najmanju energiju koju treba uložiti da bi u filmu egzistirao elektronski gas. Sve do aktivacione temperature elektroni se mogu nalaziti u nekim od vezanih stanja. S druge strane, to možemo tumačiti i tako da se u film-strukturama, za veličinu minimalnog energetskog gepa, „podigne” Fermijev nivo. Samo elektroni sa energijama većim od ove minimalne, mogu da učestvuju u transportnim i ostalim fizički interesantnim procesima.

Sve razlike izmedju posmatranih sistema su izraženije, što je film tanji, a izčeza-vaju kada debljina filma teži beskonačnosti.

5. D O D A T A K I

GRINOVE FUNKCIJE U FIZICI ĆVRSTOG STANJA

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

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

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

gde je:

$$\hat{\varrho}_t = e^{\frac{H_0 t}{i\hbar}} \hat{S}(t, t_o) e^{-\frac{H_0 t}{i\hbar}} \quad (5.2)$$

$\hat{\varrho}_t$ - neravnotežni statistički operator, ϱ_o - ravnotežni statistički operator. Za izračunavanje neravnotežnih srednjih vrednosti najpogodnije je koristiti ravnotežni operator velikog kanoničkog ansambla: $\varrho_0 = e^{(\phi + \mu \hat{N}_o - \hat{N}_o)/\theta}$

jer je velika kanonička raspodela najopštija (ona uključuje zakone održanja srednje energije i srednjeg broja čestica). Ako se (5.1) zameni u (5.2) i izvrše dve ciklične permutacije operatora, dobija se:

$$\text{Sp} \langle \hat{A}(x, t) \hat{\varrho}_t \rangle = \text{Sp} (\hat{S}^{-1}(t, t_o) e^{-\frac{H_0 t}{i\hbar}} \hat{A}(x, t) e^{\frac{H_0 t}{i\hbar}} \hat{S}(t, t_o) \hat{\varrho}_o)$$

tj.:

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

gde je

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

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

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

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

$$\langle \hat{A}(x, t) \rangle_t = \langle \hat{A}(x, t) \rangle_0 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \langle \hat{A}(x, t) \hat{T} \hat{W}(t') - \hat{T} \hat{W}(t') \hat{A}(x, t) \rangle_0 \quad (5.4)$$

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 ispred proizvoda operatora \hat{A} i \hat{W} uvodi se Hevisajdova step funkcija $\Theta(t - t')$, definisana na sledeći način:

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

Zbog toga izraz (5.4) prelazi u:

$$\langle \hat{A}(x, t) \rangle_t = \langle \hat{A}(x, t) \rangle_0 + L(t, t_0) \quad (5.5)$$

gde je:

$$L(t, t_0) = \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \Theta(t - t') \langle \hat{A}(x, t) \hat{W}(t') - \hat{W}(t') \hat{A}(x, t) \rangle_0 \quad (5.6)$$

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

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

$$\hat{H}_{int}(t') = \int dx' \hat{B}(x', t') \varepsilon(x', t') \quad (5.7)$$

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

Kako je:

$$\hat{W}(t) = \exp\left(-\frac{H_0 t}{i\hbar}\right) \hat{H}_{int}(t) \exp\left(\frac{H_0 t}{i\hbar}\right) \quad (5.8)$$

na osnovu (5.7) i (5.8) operator $W(t')$ biće:

$$\hat{W}(t') = \int dx' \hat{B}(x', t') \varepsilon(x', t') \quad (5.9)$$

gde je

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

Šredingerov operator \hat{B} napisan u reprezentaciji interakcije.

Zamenom (5.9) u (5.6) dobija se:

$$L(t, t_0) = \frac{1}{i\hbar} \int dx' \int_{t_0}^t dt' \varepsilon(x', t') G(x, x'; t, t') \quad (5.10)$$

gde je veličina:

$$G(x, x'; t, t') = \Theta(t - t') \langle \hat{A}(x, t) \hat{B}(x', t') - \hat{B}(x', t') \hat{A}(x, t) \rangle_0 \quad (5.11)$$

i naziva se dvovremenska temperaturska retardovana funkcija Grina. Ona zavisi od $6N + 2$ promenljive (dva puta po tri prostorne i dve vremenske). Ako je prostor homogen (bez defekata, primesa itd) onda Grinova funkcija, kao njegova fizička karakteristika ne zavisi od konfiguracionih koordinata x i x' ponaosob, već od njihove razlike $x - x'$, pa se broj promenljivih svodi na $3N + 2$. Ako originalni operatori ne zavise eksplicitno od vremena, tj. $\hat{A}(x, t) \equiv \hat{A}(x)$ i $\hat{B}(x, t) \equiv \hat{B}(x)$ tada Grinova funkcija ne zavisi od vremenskih koordinata t i t' ponaosob, već od njihove razlike $t - t'$ i ukupan broj promenljivih se svodi na $3N + 1$. U tom slučaju Grinova funkcija (5.11) prelazi u:

$$\begin{aligned} G(x, x'; t, t') &\longrightarrow G(x - x', t - t') = \\ &= \Theta(t - t') [\mathcal{J}_{AB}(x - x', t - t') - \mathcal{J}_{BA}(x - x', t - t')] \end{aligned} \quad (5.12)$$

Ovde su uvedene korelacione funkcije:

$$\mathcal{J}_{AB}(x - x', t - t') = \langle \hat{A}(x, t) \hat{B}(x', t') \rangle_0 ; \quad \mathcal{J}_{BA}(x - x', t - t') = \langle \hat{B}(x', t') \hat{A}(x, t) \rangle_0 \quad (5.13)$$

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

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

$$G_{\vec{n}\vec{m}}(t) \equiv \langle \langle \hat{A}_{\vec{n}}(t) | \hat{B}_{\vec{m}}(0) \rangle \rangle = \Theta(t) \langle [\hat{A}_{\vec{n}}(t), \hat{B}_{\vec{m}}(0)] \rangle_0 \quad (5.14)$$

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

$$\frac{d}{dt} G_{\vec{n}\vec{m}}(t) = \frac{d}{dt} \Theta(t) \langle [\hat{A}_{\vec{n}}(t), \hat{B}_{\vec{m}}(0)] \rangle_0 + \Theta(t) \langle \left[\frac{d\hat{A}_{\vec{n}}(t)}{dt}, \hat{B}_{\vec{m}}(0) \right] \rangle_0 \quad (5.15)$$

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

$$i\hbar \frac{d}{dt} G_{\vec{n}\vec{m}}(t) = i\hbar \delta(t) C_{\vec{n}\vec{m}} + \langle\langle [\hat{A}_{\vec{n}}(t), H(t)] \mid \hat{B}_{\vec{m}}(0) \rangle\rangle \quad (5.16)$$

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

Primenom Furieove transformacije:

$$G_{\vec{n}\vec{m}}(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega t} G_{\vec{n}\vec{m}}(\omega) \quad (5.17)$$

jednačina (5.16) prelazi u

$$\hbar\omega G_{\vec{n}\vec{m}}(\omega) = \frac{i\hbar}{2\pi} C_{\vec{n}\vec{m}} + \langle\langle [\hat{A}_{\vec{n}}(t), H(t)] \mid \hat{B}_{\vec{m}}(0) \rangle\rangle_\omega \quad (5.18)$$

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. Da bi se i izračunala tražena jednočestična, a redje dvočestična Grinova funkcija mora se ovaj beskonačan red negde prekinuti korišćenjem neke dovoljno opravdane aproksimacije.

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

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:

$$\lim_{\delta \rightarrow +0} [G_{\vec{n}\vec{m}}(\omega + i\delta) - G_{\vec{n}\vec{m}}(\omega - i\delta)] = (e^{\hbar\omega/\theta} - 1) \mathcal{J}_{\vec{B}\vec{A}}^{\vec{n}\vec{m}}(\omega) \quad (5.19)$$

gde je $\mathcal{J}_{\vec{B}\vec{A}}^{\vec{n}\vec{m}}(\omega)$ Furieov transform korelace funkcije $\mathcal{J}_{\vec{B}\vec{A}}^{\vec{n}\vec{m}}(t)$. Za $t = 0$ korelace funkcije (5.13) zapravo predstavljaju srednje vrednosti proizvoda odgovarajućih operatora.

6. DODATAK II

POLINOMI ČEBIŠEVA

Karakteristične determinante oblika:

$$C_n(x) = \begin{vmatrix} x & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & x & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & x & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \ddots & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & x & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & x & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & x \end{vmatrix}_n \quad (6.1)$$

koje odgovaraju različitim vrednostima, $n = 0, 1, 2, \dots, N$ uz prepostavljene početne uslove:

$$C_0(x) = 1 ; \quad C_1(x) = x$$

zadovoljavaju sledeću rekurentnu relaciju:

$$C_{n+1}(x) = xC_n(x) - C_{n-1}(x) \quad (6.2)$$

i nazivaju se Čebiševljevim polinomima ¹.

Uvodeći smenu: $x = 2 \cos \varphi$ determinanta (6.1) može se analitički izraziti

$$C_n(x) \longrightarrow C_n(\varphi) = \frac{\sin[(n+1)\varphi]}{\sin(\varphi)} ; \quad \varphi \neq 0 \quad (6.3)$$

Nule Čebiševljevih polinoma, koje slede iz uslova:

$$C_n(\varphi) \equiv 0 \quad (6.4)$$

date su relacijom

$$\varphi_\nu = \frac{\pi}{n+1} \nu ; \quad \nu = 1, 2, 3, \dots, n . \quad (6.5)$$

¹koja predstavlja homogenu diferencnu jednačinu drugog reda sa konstantnim koeficijentima

7. LITERATURA

- [1] B.S.Tošić, *Statistička fizika*, PMF IF, Novi Sad 1978.
- [2] A.S.Davydov, *Teoriya tverdogo tela*, Nauka, Moskva 1976.
- [3] G.Rickayzen, *Green's Functions and Condensed Matter*, Academic Press, London 1980.
- [4] Ch.Kittel, *Uvod u fiziku čvrstog stanja*, Sav.Admin. Beograd 1970.
- [5] M.I.Kaganov, *Elektrony, fonony, magnony*, Nauka, Moskva 1979.
- [6] I.Supek, *Teorijska fizika i struktura materije*, Školska knjiga, Zagreb 1977.
- [7] D.Lj.Mirjanić, J.P.Šetrajčić and B.S.Tošić, *Charge Carriers States in Bounded and Anisotropic Structures*, 8th CIMTEC - World Ceramic Congress, Florence (Italy) 1994.