

D-320

Природно-математички факултет  
Радна заједница заједничких послова  
Н О В И С А Д

Примљено: 30 - 1994			
Орг. јед.	Број	Ордаг	Вредност
0603	9/216		

UNIVERZITET U NOVOM SADU  
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET  
INSTITUT ZA FIZIKU

Slobodan A. Božić

METOD GRINOVIH FUNKCIJA U TEORIJI  
OSCILACIJA KRISTALNE REŠETKE

- DIPLOMSKI RAD -

NOVI SAD, septembar 1994.

*Kada vidiš svet u zrnu peska  
i nebo u divljem cvetu,  
držiš beskrajnost na dlanu svoje ruke  
i večnost u jednom trenu.*  
William Blake

Koristim priliku da se zahvalim svojim roditeljima na strpljenju, svom mentoru dr J.P.Šetrajiću na pomoći, kao i dr D.Kaporu na podršci.

## SADRŽAJ

	Strana
1. UVOD .....	4
2. ELEMENTI TEORIJE FONONA U KRISTALIMA .....	6
3. GRINOVE FUNKCIJE U FIZICI ČVRSTOG STANJA .....	13
4. SPEKTRI FONONA U FILMOVIMA .....	16
4.1 Fononski spektri u idealnim kristalima .....	16
4.2 Fononski spektri u film-strukturama .....	19
5. ZAKLJUČAK .....	25
6. LITERATURA .....	26

## 1. U V O D

Opšti cilj ovog rada je istraživanje fononskih spektara u idealnim, ali konačnim strukturama, dakle u strukturama bez narušenja translacione simetrije ali uz prisustvo graničnih površina tog sistema.

A zašto se ispituju baš fononi?

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

Fononi su osnovna pobuđenja u kristalu, oni su uvek prisutni podsistem bez obzira da li se radi o elektronima, eksitonima, feroelektričnim pobuđenjima ili nekom drugom tipu elementarne eksitacije kao glavnom nosiocu mehanizama koji "proizvode" određene fizičke osobine, pojave i efekte u kristalu. Takođe, fononi kao podsistem se lako termalno pobuđuju, pa su već sa malim porastom temperature iznad  $0K$  oni prisutni.

Pojam fonona se uvodi prilikom kvantnomehaničkih analiza linearnog oscilatora. Energija linearnog oscilatora ima oblik:

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega; \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

a priraštaj energije pri prelasku iz stanja  $n$  u stanje  $n + 1$  iznosi:

$$E_{n+1} - E_n = \hbar\omega$$

Ovaj kvant pobuđenja linearnog oscilatora, čija energija iznosi  $\hbar\omega$ , naziva se **fononom**. Energija fonona zavisi od mase  $M$  oscilatora i konstante  $C$  koja karakteriše elastičnu silu oscilatora tj.

$$\hbar\omega = \hbar\sqrt{\frac{C}{M}}$$



Oblast istraživanja je ograničena na analizu fonona tj. fononskih spektara u tankim strukturama ili filmovima. Filmovi predstavljaju beskonačne strukture u jednoj ravni sa dve paralelne granične površine duž pravca normalnog na tu ravan.

Posle upoznavanja osnovnih elemenata teorije fonona u kristalima, te elemenata teorije Grinovih funkcija, prvi deo rada biće posvećen analizi i pregledu najvažnijih fizičkih veličina i njihovog ponašanja za idealne („bulk”) strukture. To pre svega sa ciljem da bi dobijeni rezultati i korišćeni metodi našli kasnije primenu i omogućili lakšu analizu struktura u kojima je translaciona simetrija narušena.

U drugom delu rada će biti analizirane kolektivne mehaničke oscilacije u film – strukturi i rezultati će biti poređeni sa odgovarajućim u idealnim, kako bi se uočile razlike i pozitivne osobine istakle.

Biće najpre ispitan uticaj dveju paralelnih graničnih površina duž određenog pravca na fononske spektre. Polazeći od standardnog hamiltonijana za fononski podsistem, te korišćenjem metoda Grinovih funkcija, dolazi se do sistema jednačina, čijim se rešavanjem (u ovom slučaju se ispostavilo da je to moguće egzaktno rešiti korišćenjem Čebiševljevih polinoma) dobija izraz za zakon disperzije fonona u posmatranom filmu.

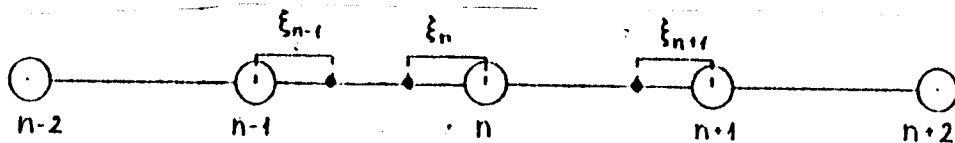
Fononski spektri poseduju gep (oni su optičkog tipa) koji iščezava sa povećanjem debljine filma.

## 2. ELEMENTI TEORIJE FONONA U KRISTALIMA

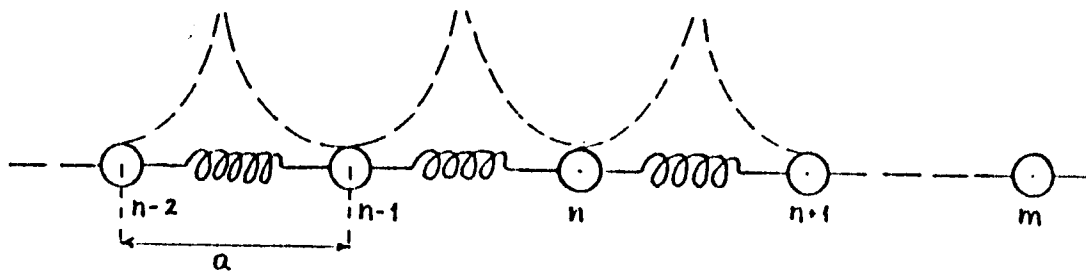
U teorijskoj fizici čvrstog stanja najčešće se analiziraju idealne strukture koje su prostorno homogene ili poseduju osobinu translacione invarijantnosti. Poznato je da čistih izotropnih kristala nema, niti se oni mogu na današnjem nivou tehnologije proizvesti, pa proučavanje idealnih struktura ne predstavlja praktičan problem. U tom smislu izučavanje neidealnih struktura dobija sve veći značaj. Rezultati tih istraživanja primereniji su potrebama i razvoju savremene tehnike i tehnologije.

Međutim, izučavanje idealnih (beskonačnih) struktura korisno je zbog toga što se za osnovne fizičke fenomene mogu izračunati njihove globalne karakteristike i dobiti ono što se obično naziva kvalitativna slika. Zatim, zaključci dobijeni na taj način kao i metodologija istraživanja mogu se u principu prenositi na neidealne strukture, a pre svega na kristalne strukture sa narušenom translacionom simetrijom.

Jednodimenzioni niz atoma iste mase  $m$  na jednakim međusobnim rastojanjima  $a$  (u položaju ravnoteže) koji vrše male oscilacije oko svojih ravnotežnih položaja duž linije po kojoj su raspoređeni (sl.1) predstavlja jednodimenzioni model kristala. Iako takvih kristala u prirodi nema, razmatranje ovog modela omogućava da se shvati priroda kretanja u realnim kristalima. Posmatranjem kretanja atoma može se pokazati da je taj sistem ekvivalentan jednom skupu međusobno zavisnih oscilatora.



Slika 1



Slika 2

Fizički procesi u kristalu povezani su sa toplotnim kretanjem atoma blizu svojih idealizovanih položaja ravnoteže. Da bi se napisao hamiltonijan fononskog sistema posmatra se najjednostavniji monoatomni kristal (sl.2).

Hamiltonijan opisanog monoatomnog kristalnog lanca je:

$$H = \sum_{\vec{n}} H_{\vec{n}} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}, \vec{m}} V(\vec{n} - \vec{m}) \quad , \quad (2.1)$$

gde je  $H_{\vec{n}}$  hamiltonijan izolovanog atoma na mestu  $\vec{n}$  u kristalu,  $V(\vec{n} - \vec{m})$  – potencijal interakcije između dva atoma na mestima  $\vec{n}$  i  $\vec{m}$  to je parna funkcija tj.  $V(\vec{n} - \vec{m}) = V(\vec{m} - \vec{n})$ . Isti oblik ima i hamiltonijan trodimenzionog kristala proste kubne strukture ( $a_x = a_y = a_z = a$ ).

Atomi ovakve kristalne rešetke osciluju oko svojih ravnotežnih položaja zbog elastičnih sila kojima na svaki atom (molekul) deluju ostali iz kristalne rešetke, pa se kristal može tretirati kao sistem povezanih oscilatora. Oscilovanje jednog atoma pomoću elastičnih međuatomskih veza se prenosi na susedne i tako se formira mehanički talas. Energija tog elastičnog talasa može imati samo diskretne vrednosti  $\hbar\omega_q(n + \frac{1}{2})$ ;  $n = 0, 1, 2, \dots$ .

Svakom pojedinačnom kvantu energije talasa  $\epsilon_q = \hbar\omega_q$  može se pripisati impuls  $p_q = \hbar k_q$ . Uveden na taj način, kvant energije kojim se prenosi mehanički talas naziva se **fonon**. Zbog međusobne povezanosti, jedan atom trpi uticaj svih ostalih atoma koji ga okružuju, pa zbog kvantovanosti toga oscilovanja onda svaki kvant tog oscilovanja nosi pečat celokupnog kolektiva atoma, te se u kristalu ne može govoriti o fononima kao pobuđenjima individualnih atoma već o fononima koji predstavljaju kvante oscilovanja celog kristala.

Ispitivanje oscilatornih karakteristika kristala, u matematičkom smislu, svodi se na traženje takve unitarne transformacije koja bi hamiltonijan sistema vezanih oscilatora prevela u ekvivalentni hamiltonijan sistema nezavisnih oscilatora.

Izraz za interakcioni član u (2.1), koji predstavlja potencijalnu energiju kristala:

$$U = \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}, \vec{m}} V(\vec{n} - \vec{m}) \quad (2.2)$$

ispravan je samo na apsolutnoj nuli tj. za "zamrznuti" kristal. Ako se temperatura povisi atomi počinju da osciluju tako da

$$\vec{n} \rightarrow \vec{n} + \vec{u}(\vec{n}), \quad \vec{m} \rightarrow \vec{m} + \vec{u}(\vec{m}) \quad (2.3)$$

gde je  $\vec{u}(\vec{n})$  pomeranje atoma iz ravnotežnog položaja  $\vec{n}$ . Tada se mora izvršiti i prelaz:

$$V(\vec{n} - \vec{m}) \rightarrow V\{(\vec{n} - \vec{m}) + [\vec{u}(\vec{n}) - \vec{u}(\vec{m})]\} \quad (2.4)$$

S obzirom da su na niskim temperaturama pomeraji  $\vec{u}(\vec{n})$  mali, koristeći standardnu teoriju malih oscilacija, razvije se funkcija  $V$  u stepeni red po Dekartovim komponentama  $u_\alpha(\vec{n})$  vektora  $\vec{u}(\vec{n})$  oko položaja ravnoteže:

$$V\{(\vec{n} - \vec{m}) + [\vec{u}(\vec{n}) - \vec{u}(\vec{m})]\} = V_0(\vec{n} - \vec{m}) + \sum_{\vec{n}\vec{m}, \alpha} \left[ \frac{\partial V(\vec{n} - \vec{m})}{\partial(\vec{n} - \vec{m})_\alpha} \right]_0 [u_\alpha(\vec{n}) - u_\alpha(\vec{m})] \quad (2.5)$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}, \alpha\beta} \left[ \frac{\partial^2 V(\vec{n} - \vec{m})}{\partial(\vec{n} - \vec{m})_\alpha \partial(\vec{n} - \vec{m})_\beta} \right]_0 [u_\alpha(\vec{n}) - u_\alpha(\vec{m})] [u_\beta(\vec{n}) - u_\beta(\vec{m})] + \dots$$

$\alpha, \beta$  označavaju moguće projekcije vektora na ose Dekartovog sistema.

Svaki atom leži u nekoj potencijalnoj jami (kao na sl.2), pa iz uslova stabilnosti kristala sledi da je drugi sabirak s desne strane znaka jednakosti u izrazu (2.5) jednak nuli. Dakle, oscilovanje karakteriše samo treći sabirak u izrazu (2.5), tzv. harmonijski član. Ako se ovaj član sumira po svim čvorovima i doda mu se kinetička energija  $\sum_{\vec{n}\alpha} M \dot{u}_\alpha^2 / 2$ , dobija se oscilatorni hamiltonijan sistema:

$$H = \sum_{\vec{n}\alpha} \frac{M}{2} \dot{u}_\alpha^2(\vec{n}) + \frac{1}{4} \sum_{\vec{n}\vec{m}, \alpha\beta} C_{\alpha\beta}(\vec{n} - \vec{m}) [u_\alpha(\vec{n}) - u_\alpha(\vec{m})] [u_\beta(\vec{n}) - u_\beta(\vec{m})] \quad (2.6)$$

gde su  $C_{\alpha\beta}(\vec{n} - \vec{m}) = \left[ \frac{\partial^2 V(\vec{n} - \vec{m})}{\partial(\vec{n} - \vec{m})_\alpha \partial(\vec{n} - \vec{m})_\beta} \right]_0$  - Hukove konstante elastičnosti.

Pošto sile koje deluju između atoma najčešće brzo opadaju sa porastom rastojanja  $|\vec{n} - \vec{m}|$  između atoma, to se izraz za potencijalnu energiju može napisati na sledeći način:

$$V(\vec{n} - \vec{m}) \sim \frac{1}{|\vec{n} - \vec{m}|^\gamma}, \quad \gamma > 1.$$



(Lenard-Džonsov potencijal koji je proporcionalan  $Ar^{-6} - Br^{-12}$ , najbolje „pali” kod fonona u slučaju kovalentnih i molekulskih kristala). Tada se izraz za potencijalnu energiju u (2.6) može napisati u aproksimaciji najbližih suseda, koja se sastoji u zameni sumiranja  $\vec{n}, \vec{m} \rightarrow \vec{n}, \vec{n} \pm \vec{\lambda}$ , gde  $\vec{\lambda}$  povezuje atom na mestu  $\vec{n}$  sa njegovim najbližim susedima. Kako je intenzitet  $\vec{\lambda}$  za sve najbliže susede isti (idealni kristal!), koeficijent  $C_{\alpha\beta}(\vec{\lambda})$  ne zavisi od  $\vec{\lambda}$ . Tada hamiltonijan (2.6) postaje:

$$H = \sum_{\vec{n}\alpha} \frac{M}{2} \dot{u}_{\alpha}^2(\vec{n}) + \frac{1}{4} \sum_{\vec{n}\vec{\lambda}, \alpha\beta} C_{\alpha\beta} [u_{\alpha}(\vec{n}) - u_{\alpha}(\vec{n} \pm \vec{\lambda})] [u_{\beta}(\vec{n}) - u_{\beta}(\vec{n} \pm \vec{\lambda})] \quad (2.7)$$

Koristeći se običnim formalizmom kvantne mehanike (npr. Hajzenbergovim jednačinama kretanja), dobija se diferencijalna jednačina koja opisuje male pomeraje bilo kog od atoma kristala oko njegovog ravnotežnog položaja:

$$M\ddot{u}_{\alpha}(\vec{n}) = \frac{1}{2} \sum_{\vec{\lambda}\beta} C_{\alpha\beta} [u_{\beta}(\vec{n} + \vec{\lambda}) + u_{\beta}(\vec{n} - \vec{\lambda}) - 2u_{\beta}(\vec{n})] \quad (2.8)$$

Rešenje sistema jednačina (2.8) traži se u obliku ravnih talasa

$$u_{\alpha}(\vec{n}) = A_{\alpha}(\vec{k}) e^{i(\vec{k}\vec{n} - \omega t)} \quad (2.9)$$

Smena (2.9) u (2.8) vodi na sistem od  $3N$  homogenih algebarskih jednačina za nepoznate amplitude  $A_{\alpha}(\vec{k})$ :

$$\sum_{\beta} [\omega^2 \delta_{\alpha\beta} - f(\vec{k}) C_{\alpha\beta}] A_{\beta}(\vec{k}) = 0; \quad \alpha, \beta \in (x, y, z); \quad (2.10)$$

gde je:

$$f(\vec{k}) = \frac{2}{M} \sum_{\vec{\lambda}} \sin^2 \frac{\vec{k} \cdot \vec{\lambda}}{2}$$

Zbog uslova netrivialnosti ovih rešenja, determinanta sistema (2.10) mora biti jednaka nuli, tj.

$$\det \|\omega^2 \delta_{\alpha\beta} - f(\vec{k}) C_{\alpha\beta}\| = 0 \quad (2.11)$$

Ovaj uslov daje za svaku vrednost  $\vec{k}$  tri pozitivna rešenja za dozvoljene frekvencije  $\omega$  koje zavise od mase atoma  $M$  i Hukovih konstanti elastičnosti  $C_{\alpha\beta}$ , kao i kod izolovanog oscilatora, ali se razlikuju po tome što zavise od talasnog vektora  $\vec{k}$ , pa se može reći da u kristalu postoji čitav spektar frekvencija  $\omega = \omega(\vec{k})$  i vrednost ovih frekvencija zavisi od talasnih dužina mehaničkih talasa koji se prostiru kroz kristal. Pod pretpostavkom da su torzione konstante  $C_{\alpha,\beta} (\alpha \neq \beta)$  zanemarive u odnosu na konstante istezanja  $C_{\alpha,\alpha}$ , iz uslova netrivialnosti rešenja:

$$\det \|\omega^2 \delta_{\alpha,\beta} - f(\vec{k}) C_{\alpha,\alpha}\| = 0,$$

dobija se zakon disperzije fonona:

$$\omega_i(\vec{k}) = 2\varepsilon \sqrt{\sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y}{2} + \sin^2 \frac{ak_z}{2}}. \quad (2.12)$$

gde je  $\varepsilon = \hbar \sqrt{\frac{C}{M}} \simeq \frac{\hbar v}{a}$ ,  $v$  - je usrednjena brzina zvuka,  $C$  - usrednjena Hukova konstanta, tj.

$$v = \frac{1}{3} \sum_{\alpha} v_{\alpha}; \quad C = \frac{1}{3} \sum_{\alpha} C_{\alpha, \alpha}.$$

Kod niza sa tri stepena slobode postoje tri načina oscilovanja: jedno duž pravca niza i dva uzajamno normalna u ravnina, normalnim na osu niza. U ovakvim sistemima se javlja mogućnost rasprostiranja dva vida talasa: longitudinalni i transverzalni. To sledi iz uslova normiranja. Kod longitudinalnih talasa vektor pomeraja atoma  $\vec{u}(\vec{k})$  usmeren je duž lanca i podudara se sa pravcem prostiranja talasa  $\vec{e}_1 \parallel \vec{k}$ .

Kod transverzalnih talasa, vektor polarizacije  $\vec{e}_2$  usmeren je normalno osi lanca i normalan je na talasni vektor  $\vec{k}$ ,  $\vec{e}_2 \perp \vec{k}$ . Za male vrednosti  $\vec{k}$  zakoni disperzije longitudinalnih i transverzalnih talasa imaju isti oblik:

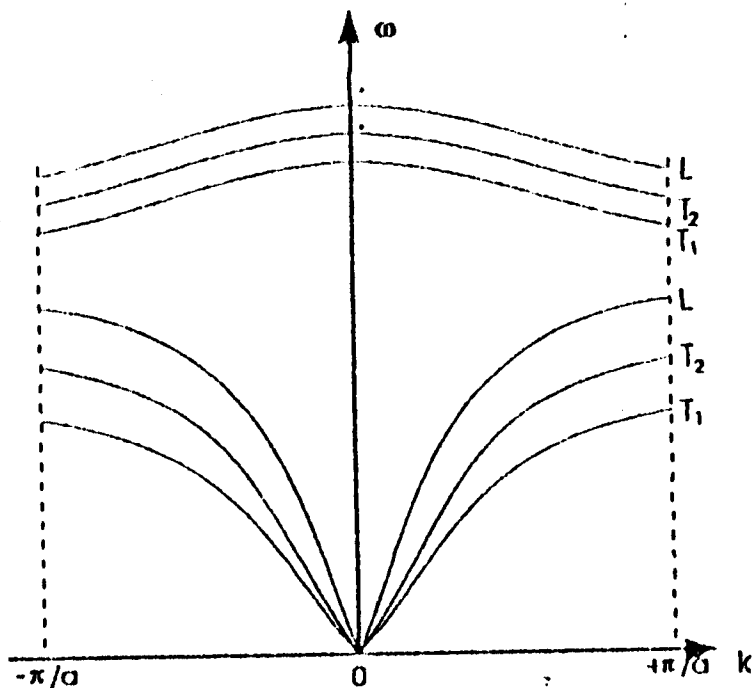
$$\omega_{\parallel} = v_{\parallel} k; \quad \omega_{\perp} = v_{\perp} k$$

S obzirom da su oscilacije lanca u ravni normalnoj na osu lanca izotropne,  $v_{\perp}$  ne zavisi od pravca vektora polarizacije u transverzalnom talasu. Zbog toga se zakon disperzije u trodimenzionalnom slučaju podudara sa zakonom disperzije u dvodimenzionalnom slučaju, tj. grana  $\omega_{\perp}(k)$  je dvostruko degenerisana.

U kristalima sa prostom elementarnom ćelijom sve tri komponente frekvencija mehaničkih talasa  $\omega_{\alpha}(k)$  teže ka nuli kada  $k \rightarrow 0$ . Takvi kvanti mehaničkih pobudjenja sa linearnim zakonom disperzije zovu se - **akustičkim fononima**.

Ako se na sličan način analizira kristal složene strukture sa  $\sigma$  podrešetki po elementarnoj ćeliji, onda se za dozvoljene frekvencije dobija  $3\sigma$  rešenja, od kojih tri frekvencije uvek teže nuli kada  $k \rightarrow 0$  i odgovaraju akustičkim fononskim granama, dok za ostale  $(3\sigma - 3)$  grane važi  $\lim_{k \rightarrow 0} \omega(k) \neq 0$  a mehaničke oscilacije sa ovom osobinom zovu se - **optičkim fononima** (sl.3).

Ova razmatranja se odnose na fononske spektre u okviru jedne elementarne ćelije. Trodimenzioni kristal sa  $N$  elementarnih ćelija i  $\sigma$  podrešetki ima  $3N\sigma$  stepeni slobode kretanja. Fononski spektar onda uvek čine 3 akustičke grane i  $3N\sigma - 3$  optičkih grana.



Slika 3

Hamiltonijan (2.7) konstruisan na već izložen način tretira ponašanje sistema. Kako je on kvadratni, može se dijagonalizovati Furijeovom transformacijom (2.9), tj. nalaženjem rešenja u obliku ravnih talasa.

Prelazak u reprezentaciju druge kvantizacije koristi isti oblik hamiltonijana, samo se u izrazu (2.9) za pomeraje prelazi na boze-operatori  $b_j^\dagger(\vec{k})$  i  $b_j(\vec{k})$  koji kreiraju, odnosno anihiliraju fonone sa energijom  $\hbar\omega_j(\vec{k})$ . Novi operatori zadovoljavaju sledeće komutacione relacije:

$$[b_i(\vec{k}), b_j^\dagger(\vec{l})] = \delta_{\vec{k}\vec{l}} \cdot \delta_{ij},$$

$$[b_i(\vec{k}), b_j(\vec{l})] = [b_i^\dagger(\vec{k}), b_j^\dagger(\vec{l})] = 0.$$

Na taj način se kvantnomehanički hamiltonijan, oblika (2.7), može unitarnom transformacijom svesti na hamiltonijan sistema nezavisanih oscilatora tj. dijagonalizovati i naći energija fonona u idealnoj beskonačnoj strukturi. Ona se sastoji u razvoju pomeraja  $\vec{u}(\vec{n})$  po ravnim talasima tipa:

$$\vec{u}(\vec{n}) = \sum_{\vec{k}_j} \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_j(\vec{k})}} [b_j^\dagger(\vec{k})e^{-i(\vec{k}\vec{n}-\omega_j(\vec{k})t)} + h.c.] \vec{l}_j(\vec{k}), \quad j \in (x, y, z) \quad (2.13)$$

gde je  $N = N_x N_y N_z$  - broj atoma (molekula) u elementarnoj ćeliji kristala,  $\vec{l}_j(\vec{k})$  polarizacioni fononski vektori koji su normirani na sledeći način:

$$\vec{l}_i(\vec{k}) \cdot \vec{l}_j(\vec{k}) = \delta_{ij}, \quad i, j \in (x, y, z) \quad (2.14)$$

i  $b_j^\dagger(\vec{k})$  operatori kreacije fonona sa impulsom  $\vec{k}$ . Uvođenjem Boze-amplituda kao koeficijenata u razvoju (2.13), prelazi se na kvantnomehanički tretman oscilatornih pojava u kristalu. Klasičan tretman doveo bi do sličnog rezultata, s razlikom što se u klasičnom rezultatu ne bi pojavio član  $\frac{1}{2} \sum_{\vec{k}_j} \hbar \omega_j(\vec{k})$ , koji definiše energiju nultih oscilacija.

Zamenom (2.13) u (2.7) i na osnovu činjenice da su komponente vektora  $\vec{n}$  i  $\vec{k}$  date sa:

$$|\vec{n}|_\alpha = n_\alpha a_\alpha; \quad |\vec{k}|_\alpha = \frac{2\pi\nu_\alpha}{N_\alpha a_\alpha}; \quad -\frac{N_\alpha}{2} \leq (\nu_\alpha, n_\alpha) \leq \frac{N_\alpha}{2}, \quad \alpha \in (x, y, z) \quad (2.15)$$

gde su  $n_\alpha$  i  $\nu_\alpha$  celi brojevi,  $N_\alpha$  - brojevi atoma i  $a_\alpha$  konstante rešetke duž odgovarajućih osa, hamiltonijan (2.7) postaje:

$$H = \sum_{\vec{k}, j} \left[ b_j^\dagger(\vec{k}) b_j(\vec{k}) + \frac{1}{2} \right] \hbar \omega_j(\vec{k}) \quad (2.16)$$

Vidi se da je hamiltonijan dat kao suma hamiltonijana nezavisnih oscilatora:

$$H_{\vec{k}} = \left[ n_j(\vec{k}) + \frac{1}{2} \right] E_j(\vec{k}), \quad (2.17)$$

pri čemu su energije fonona  $E_j(\vec{k}) = \hbar \omega_j(\vec{k})$  i broj fonona:  $n_j(\vec{k}) = b_j^\dagger(\vec{k}) b_j(\vec{k})$ .

### 3. GRINOVE FUNKCIJE U FIZICI ČVRSTOG STANJA

Jedan od osnovnih zadataka statističke fizike je nalaženje srednjih vrednosti dinamičkih veličina. Tako se za veličinu  $\hat{A}(x, t)$  definiše srednja vrednost:

$$\langle \hat{A}(x, t) \rangle_t = \langle \hat{S}^{-1}(t, t_0) \hat{A}(x, t) \hat{S}(t, t_0) \rangle_0, \quad (3.1)$$

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 napisan u reprezentaciji interakcije, a  $\langle \dots \rangle_0$  označava ravnotežnu srednju vrednost odgovarajuće veličine.  $\hat{S}(t, t_0)$  je unitarni operator - matrica rasejanja. Treba napomenuti da se za nalaženje ovih srednjih vrednosti mora koristiti statistički ravnotežni operator velikog kanonskog ansambla:  $\hat{\rho}_0 = \exp\left(\frac{\Phi + \mu N_0 - H_0}{\theta}\right)$  jer je velika kanonska raspodela najopštija (ona uključuje zakone održanja i srednje energije i srednjeg broja čestica).

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

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

tada je

$$\langle \hat{A}(x, t) \rangle_t = \langle \hat{A}(x, t) \rangle_0 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \langle \hat{A}(x, t) \hat{T} \hat{W}(t') - \hat{T} \hat{W}(t') \hat{A}(x, t) \rangle_0 \quad (3.2)$$

Hronološki operator  $\hat{T}$  deluje samo na  $\hat{W}(t')$  pa se on ne mora ni pisati jer ovaj izraz ima smisla samo za  $t > t'$ . Zato se uvodi Hevisajdova step funkcija  $\Theta(t - t')$  pa izraz (3.2) prelazi u:

$$\langle \hat{A}(x, t) \rangle_t = \langle \hat{A}(x, t) \rangle_0 + L(t, t_0) \quad (3.3)$$

pri čemu se veličina

$$L(t, t_0) = \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \Theta(t - t') \langle \hat{A}(x, t) \hat{W}(t') - \hat{W}(t') \hat{A}(x, t) \rangle_0 \quad (3.4)$$

naziva linearni odziv sistema.

Ako se operator interakcije predstavi u obliku:

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

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 napisan u reprezentaciji interakcije, a funkcije  $\varepsilon(x', t')$  nemaju operatorsku strukturu i nazivaju se C-brojevima, onda se linearni odziv može napisati kao:

$$L(t, t_0) = \frac{1}{i\hbar} \int dx' \int_{t_0}^t dt' \varepsilon(x', t') G(x, x'; t, t') \quad (3.5)$$

Veličina

$$G(x, x'; t, t') = \Theta(t - t') \langle \hat{A}(x, t) \hat{B}(x', t') - \hat{B}(x', t') \hat{A}(x, t) \rangle_0 \quad (3.6)$$

se naziva 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 njegoa 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 (3.6) prelazi u:

$$\begin{aligned} G(x, x'; t, t') &\longrightarrow G(x - x', t - t') = \\ &= \Theta(t - t') [\mathcal{J}_{AB}(x - x', t - t') - \mathcal{J}_{BA}(x - x', t - t')] \end{aligned} \quad (3.7)$$

Ovde su uvedene korelacione funkcije:

$$\mathcal{J}_{AB}(x - x', t - t') = \langle \hat{A}(x, t) \hat{B}(x', t') \rangle_0; \quad \mathcal{J}_{BA}(x - x', t - t') = \langle \hat{B}(x', t') \hat{A}(x, t) \rangle_0 \quad (3.8)$$

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  $x' \rightarrow \vec{m}$  izraz za Grinovu funkciju može da se napiše u sledećem obliku:

$$G_{\vec{n}\vec{m}}(t - t') \equiv \langle \langle \hat{A}_{\vec{n}}(t) | \hat{B}_{\vec{m}}(t') \rangle \rangle = \Theta(t - t') \langle [\hat{A}_{\vec{n}}(t), \hat{B}_{\vec{m}}(t')] \rangle_0 \quad (3.9)$$

Za najrasprostranjeniji način izračunavanja korelacionih funkcija, pa prema tome i svih relevantnih karakteristika sistema, smatra se metod jednačina kretanja za funkcije Grina. Za dvovremenske, temperaturski zavisne Grinove funkcije njega su razvili Bogoljubov i Tjablikov još 1959. godine:

$$\frac{d}{dt} G_{\vec{n}\vec{m}}(t - t') = \frac{d}{dt} \Theta(t - t') \langle [\hat{A}_{\vec{n}}(t), \hat{B}_{\vec{m}}(t')] \rangle_0 + \Theta(t - t') \langle \left[ \frac{d\hat{A}_{\vec{n}}(t)}{dt}, \hat{B}_{\vec{m}}(t') \right] \rangle_0 \quad (3.10)$$

Korišćenjem jednačina kretanja za operatore fizičkih veličina, ovaj izraz se svodi na

$$i\hbar \frac{d}{dt} G_{\bar{n}\bar{m}}(t-t') = i\hbar \delta(t-t') C_{\bar{n}\bar{m}} + \langle\langle [\hat{A}_{\bar{n}}(t), H(t)] | \hat{B}_{\bar{m}}(t') \rangle\rangle \quad (3.11)$$

Primenom Furieove transformacije

$$G_{\bar{n}\bar{m}}(t-t') = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega(t-t')} G_{\bar{n}\bar{m}}(\omega) \quad (3.12)$$

jednačina (3.11) prelazi u

$$\hbar\omega G_{\bar{n}\bar{m}}(\omega) = \frac{i\hbar}{2\pi} C_{\bar{n}\bar{m}} + \langle\langle [\hat{A}_{\bar{n}}(t), H(t)] | \hat{B}_{\bar{m}}(t') \rangle\rangle_{\omega} \quad (3.13)$$

Vidi se da se Grinova funkcija  $G_{\bar{n}\bar{m}}(\omega) \equiv \langle\langle \hat{A}_{\bar{n}}(t) | \hat{B}_{\bar{m}}(t') \rangle\rangle_{\omega}$  izražava preko nove - više Grinove funkcije  $\langle\langle [\hat{A}_{\bar{n}}(t), H(t)] | \hat{B}_{\bar{m}}(t') \rangle\rangle_{\omega}$ . Više Grinove funkcije se računaju na isti način kao i obične (pomoću jednačina kretanja) te se tako dobija beskonačan niz, tzv. hijerarhiju vezanih jednačina za određivanje Grinove funkcije. Da bi se i izračunala tražena jednočestična, a rede dvočestična Grinova funkcija mora se ovaj beskonačan red negde prekinuti korišćenjem neke dovoljno opravdane aproksimacije. U konkretnom slučaju, u sledećoj glavi, ćemo pokazati kako se ovo sprovodi.

Interesantno je još podvući da Grinove funkcije imaju i dublji fizički smisao. Naime, realni deo njenog pola predstavlja energije elementarnih pobuđenja dok recipročna vrednost imaginarnog dela njenog pola određuje vreme života tih ekscitacija.

Pored toga, neophodno je dati vezu između 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:

$$\lim_{\delta \rightarrow +0} [G_{\bar{n}\bar{m}}(\omega + i\delta) - G_{\bar{n}\bar{m}}(\omega - i\delta)] = (e^{\hbar\omega/\theta} - 1) \mathcal{J}_{\bar{B}\bar{A}}^{\bar{n}\bar{m}}(\omega) \quad (3.14)$$

gde je  $\mathcal{J}_{\bar{B}\bar{A}}^{\bar{n}\bar{m}}(\omega)$  Furieov transform korelacione funkcije  $\mathcal{J}_{\bar{B}\bar{A}}^{\bar{n}\bar{m}}(t-t')$ . Za  $t = t' = 0$  corelacione funkcije (3.8) zapravo predstavljaju srednje vrednosti proizvoda odgovarajućih operatora.

Znači, poznavanje Grinovih funkcija omogućava nalaženje energije osnovnog stanja sistema, spektar i vrste elementarnih pobuđenja, te termodinamička svojstva u ravnotežnim i neravnotežnim stanjima posmatranog sistema.

## 4. SPEKTRI FONONA U FILMOVIMA

Ovo poglavlje biće posvećeno istraživanju zakona disperzije fonona u film-strukturama pomoću Grinovih funkcija. Da bi se uočile razlike i uticaji postojanja dveju graničnih površina na moguće fononske energije u odnosu energije fonona u strukturama u kojima nije narušena translaciona simetrija, pomenuti metod istraživanja primenićemo prvo na idealne kubne kristale.

### 4.1 Fononski spektri u idealnim kristalima

Idealne beskonačne strukture su kristali sa osobinom translacione invarijantnosti u tri uzajamno nekomplanarna pravca. Ovi, pravci koji se uvode u kristalografiji ne moraju biti uzajamno ortogonalni, pa se zato obično u teorijskoj fizici kondenzovane materije uvodi dodatni, Dekartov sistem. Mi ćemo posmatrati samo kubni kristal kada su kristalografski uvedeni pravci uzajamno ortogonalni i ovih problema nema.

Hamiltonijan sistema u aproksimaciji najbližih suseda može da se napiše u obliku:

$$H = \sum_{\alpha, \vec{n}} \frac{p_{\alpha, \vec{n}}^2}{2M} + V_{eff} \quad (4.1)$$

gde je  $p$  impuls atoma kristala,  $M$  masa atoma dok je efektivni međuatomski potencijal interakcije zadat izrazom :

$$V_{eff} = \sum_{\alpha; n_x, n_y, n_z} \frac{C_{\alpha\alpha}}{4} \left[ \left( u_{\alpha; n_x+1, n_y, n_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z} \right)^2 + \left( u_{\alpha; n_x-1, n_y, n_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z} \right)^2 + \right. \\ \left. + \left( u_{\alpha; n_x, n_y+1, n_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z} \right)^2 + \left( u_{\alpha; n_x, n_y-1, n_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z} \right)^2 + \right. \\ \left. + \left( u_{\alpha; n_x, n_y, n_z+1} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z} \right)^2 + \left( u_{\alpha; n_x, n_y, n_z-1} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z} \right)^2 \right] \quad (4.2)$$



Zakon disperzije fonona ispitaćemo metodom Grinovih funkcija opisanim u prethodnom poglavlju. U tu svrhu potražićemo dvovremensku temperatursku Grinovu funkciju:

$$G_{\vec{n}\vec{m}}^{\alpha\alpha}(t-t') \equiv \langle\langle u_{\alpha;\vec{n}}(t) | u_{\alpha;\vec{m}}(t') \rangle\rangle = \Theta(t-t') \langle\langle [u_{\alpha;\vec{n}}(t), u_{\alpha;\vec{m}}(t')] \rangle\rangle_0 \quad (4.3)$$

Dvostrukim diferenciranjem ovog izraza po vremenu ( $t$ ) dobija se:

$$M \frac{d^2}{dt^2} G_{\vec{n}\vec{m}}^{\alpha\alpha}(t-t') = -i\hbar \delta_{\vec{n}\vec{m}} \delta(t-t') + \frac{\Theta(t-t')}{i\hbar} \langle\langle [p_{\alpha;\vec{n}}(t), H(t)], u_{\alpha;\vec{m}}(t') \rangle\rangle_0$$

Ovde se javlja problem vremenskog izvoda delta-funkcije, koji zaista ne daje doprinos ovoj jednačini, ali se to može dokazati tek mnogo kasnije, pa to na ovom mestu treba primiti bez dokaza.

Furije  $t \rightarrow \omega$  transformacijom poslednji izraz prelazi u:

$$-M\omega^2 G_{\vec{n}\vec{m}}^{\alpha\alpha}(\omega) = -\frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{\vec{n}\vec{m}} + \frac{1}{i\hbar} \langle\langle [p_{\alpha;\vec{n}}, H] | u_{\alpha;\vec{m}} \rangle\rangle_\omega \quad (4.4)$$

Dalji postupak određivanja Grinove funkcije zahteva izračunavanje komutatora koji figuriše u višoj Grinovoj funkciji iz gornje jednačine.

$$\begin{aligned} [p_{\beta;m_x,m_y,m_z}, H] &= [p_{\beta;m_x,m_y,m_z}, V_{eff}] = \sum_{\alpha;n_x,n_y,n_z} \frac{C_{\alpha\alpha}}{4} \times \\ &\times \left\{ 2 [p_{\beta;m_x,m_y,m_z}, (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x+1,n_y,n_z})] (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x+1,n_y,n_z}) + \right. \\ &+ 2 [p_{\beta;m_x,m_y,m_z}, (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x-1,n_y,n_z})] (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x-1,n_y,n_z}) + \\ &+ 2 [p_{\beta;m_x,m_y,m_z}, (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y+1,n_z})] (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y+1,n_z}) + \\ &+ 2 [p_{\beta;m_x,m_y,m_z}, (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y-1,n_z})] (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y-1,n_z}) + \\ &+ 2 [p_{\beta;m_x,m_y,m_z}, (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,n_z+1})] (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,n_z+1}) + \\ &+ 2 [p_{\beta;m_x,m_y,m_z}, (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,n_z-1})] (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,n_z-1}) \left. \right\} = \\ &= -i\hbar \sum_{\alpha;n_x,n_y,n_z} \frac{C_{\alpha\alpha}}{2} \delta_{\alpha\beta} \left[ (\delta_{\vec{n}\vec{m}} - \delta_{n_x+1,m_x} \delta_{n_y,m_y} \delta_{n_z,m_z}) (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x+1,n_y,n_z}) + \right. \\ &+ (\delta_{\vec{n}\vec{m}} - \delta_{n_x-1,m_x} \delta_{n_y,m_y} \delta_{n_z,m_z}) (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x-1,n_y,n_z}) + \\ &+ (\delta_{\vec{n}\vec{m}} - \delta_{n_x,m_x} \delta_{n_y+1,m_y} \delta_{n_z,m_z}) (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y+1,n_z}) + \\ &+ (\delta_{\vec{n}\vec{m}} - \delta_{n_x,m_x} \delta_{n_y-1,m_y} \delta_{n_z,m_z}) (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y-1,n_z}) \left. \right] + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + (\delta_{\vec{n}\vec{m}} - \delta_{n_x, m_x} \delta_{n_y, m_y} \delta_{n_z+1, m_z}) (u_{\alpha; n_x, n_y, n_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z+1}) + \\
& + (\delta_{\vec{n}\vec{m}} - \delta_{n_x, m_x} \delta_{n_y, m_y} \delta_{n_z-1, m_z}) (u_{\alpha; n_x, n_y, n_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z-1}) \Big] = \\
& = -i\hbar \frac{C_{\beta\beta}}{2} (u_{\beta, m_x, m_y, m_z} - u_{\beta, m_x+1, m_y, m_z} - u_{\beta, m_x-1, m_y, m_z} + u_{\beta, m_x, m_y, m_z} + \\
& + u_{\beta, m_x, m_y, m_z} - u_{\beta, m_x-1, m_y, m_z} - u_{\beta, m_x+1, m_y, m_z} + u_{\beta, m_x, m_y, m_z} + u_{\beta, m_x, m_y, m_z} - \\
& - u_{\beta, m_x, m_y+1, m_z} - u_{\beta, m_x, m_y-1, m_z} + u_{\beta, m_x, m_y, m_z} + u_{\beta, m_x, m_y, m_z} - u_{\beta, m_x, m_y+1, m_z} - \\
& - u_{\beta, m_x, m_y-1, m_z} + u_{\beta, m_x, m_y, m_z} + u_{\beta, m_x, m_y, m_z} - u_{\beta, m_x, m_y, m_z+1} - u_{\beta, m_x, m_y, m_z-1} + \\
& + u_{\beta, m_x, m_y, m_z} + u_{\beta, m_x, m_y, m_z} - u_{\beta, m_x, m_y, m_z+1} - u_{\beta, m_x, m_y, m_z-1} + u_{\beta, m_x, m_y, m_z}) = \\
& = -i\hbar C_{\beta\beta} (6u_{\beta, m_x, m_y, m_z} - u_{\beta, m_x+1, m_y, m_z} - u_{\beta, m_x-1, m_y, m_z} - \\
& - u_{\beta, m_x, m_y+1, m_z} - u_{\beta, m_x, m_y-1, m_z} - u_{\beta, m_x, m_y, m_z+1} - u_{\beta, m_x, m_y, m_z-1}) ;
\end{aligned}$$

Ovde smo koristili komutacione relacije za koordinatu i impuls:

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

Zamenom nadenog komutatora u jednačinu (4.4) dobijamo:

$$\begin{aligned}
-M\omega^2 G_{n_x, n_y, n_z; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha} & = -\frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{n_x, m_x} \delta_{n_y, m_y} \delta_{n_z, m_z} - C_{\alpha\alpha} (6G_{n_x, n_y, n_z; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha} - \\
& - G_{n_x+1, n_y, n_z; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha} - G_{n_x-1, n_y, n_z; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha} - G_{n_x, n_y+1, n_z; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha} - \\
& - G_{n_x, n_y-1, n_z; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha} - G_{n_x, n_y, n_z+1; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha} - G_{n_x, n_y, n_z-1; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha})
\end{aligned} \quad (4.5)$$

Primenom nove Furije transformacije ( $\vec{n}, \vec{m} \rightarrow \vec{k}$ ):

$$G_{\vec{n}\vec{m}}^{\alpha\alpha}(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} e^{-i(\vec{n}-\vec{m})\vec{k}} G_{\vec{k}}^{\alpha}(\omega)$$

na jednačinu (4.5), te nakon neznatnih algebarskih transformacija, ona prelazi u:

$$\left[ \frac{M\omega^2}{C_{\alpha\alpha}} - 2(\cos a_x k_x + \cos a_y k_y + \cos a_z k_z) + 6 \right] G_{\vec{k}}^{\alpha}(\omega) = \frac{i\hbar}{2\pi C_{\alpha\alpha}} \quad (4.6)$$

Očigledno, polovi Grinove funkcije su nalaze kada se izraz u uglastoj zagradi izjednači sa nulom . Njenim rešavanjem po  $\omega \equiv \omega_{\alpha}(\vec{k})$  dobijamo traženi zakon disperzije fonona:

$$E_{\alpha}(\vec{k}) \equiv \hbar\omega_{\alpha}(\vec{k}) = 2\hbar\Omega_{\alpha} \sqrt{\sin^2 \frac{a_x k_x}{2} + \sin^2 \frac{a_y k_y}{2} + \sin^2 \frac{a_z k_z}{2}} \quad (4.7)$$

gde je  $\Omega_\alpha = \sqrt{C_{\alpha\alpha}/M}$ . U aproksimaciji malih talasnih vektora, relacija (4.7) se svodi na:

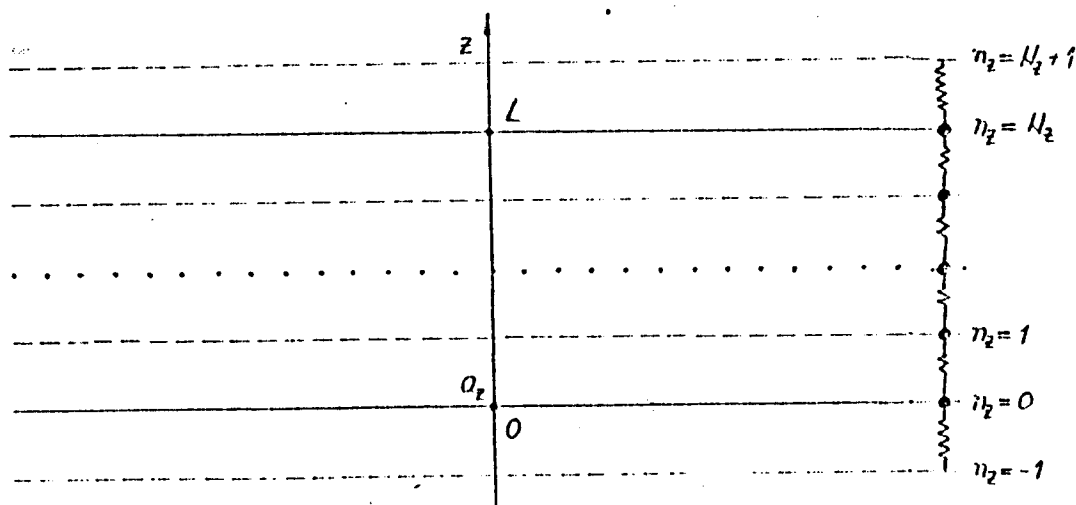
$$E_\alpha(\vec{k}) = \hbar \Omega_\alpha a k \quad (4.8)$$

pri čemu su  $a = a_x = a_y = a_z$ ,  $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}$ .

Ovo je tipičan zakon disperzije akustičkih fonona.

## 4.2 Fononski spektri u film-strukturama

Realni kristali, za razliku od idealnih struktura, imaju granične površine. Narušenje simetrije je posledica postojanja izvesnih graničnih uslova. Sistemi koji imaju dve paralelne granične površine nazivaju se filmovima.



Slika 4.1:  $n_z$  - indeks rešetke duž  $z$ -pravca i  $n_z \in (0, 1, 2, \dots, N_z)$

Posmatra se tanki film "istrgnut" iz idealne kubne kristalne strukture, takav da je u  $XY$  - ravnima beskonačan, a u  $z$  - pravcima ima konačnu debljinu. Znači da ovaj film poseduje dve beskonačne granične površine paralelne  $XY$  - ravnima i to

za  $z = 0$  i  $z = L$ . Pretpostavlja se da je u ovom modelu duž  $z$ -ose locirano  $N_z + 1$  atoma i da su torzione konstante  $C_{\alpha\beta}$  zanemarljive u odnosu na konstante istezanja  $C_{\alpha\alpha}$ . Parametri elementarne ćelije posmatranog filma su onda:  $a_x = a_y = a_z = a$  (slika 4.1).

Hamiltonijan fononskog podsistema opisanog idealnog filma u aproksimaciji najbližih suseda ima isti oblik kao i kod neograničenih kristala (4.1), ali se zbog postojanja graničnih slojeva mora napisati u razdvojenom vidu:

$$H = H_P + H_Z. \quad (4.9)$$

Uzimajući u obzir uslove  $C_{\alpha\alpha,i} = C_{\alpha\alpha}$ ,  $i = -1, 0, 1, N_z - 1, N_z, N_z + 1$  i činjenicu da su slojevi za  $n_z \leq -1$  i za  $n_z \geq N_z + 1$  odsutni, moramo obračunati sledeće:

$$u_{\alpha,n_x,n_y,j} = 0; \quad -1 \geq j; \quad j \geq N_z + 1; \quad (j \notin [0, N_z]),$$

ali i:

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

Kad bi  $C_{\alpha\alpha,-1} = C_{\alpha\alpha,N_z+1} = 0$ , tada bi granični atomi za  $n_z = 0$  i  $n_z = N_z$  bili "zamrznuti", tj. imali bismo efekat "kristalnih zidova".

Na taj način se izraz za "površinski" hamiltonijan može napisati u sledećem obliku:

$$\begin{aligned} H_P = & \frac{1}{2M} \sum_{\alpha} \sum_{n_x, n_y} (p_{\alpha;n_x, n_y, 0}^2 + p_{\alpha;n_x, n_y, N_z}^2) + \\ & + \frac{1}{4} \sum_{\alpha} C_{\alpha\alpha} \sum_{n_x, n_y} [2u_{\alpha;n_x, n_y, 0}^2 + 2u_{\alpha;n_x, n_y, N_z}^2 + \\ & + 2(u_{\alpha;n_x, n_y, N_z-1} - u_{\alpha;n_x, n_y, N_z})^2 + 2(u_{\alpha;n_x, n_y, 1} - u_{\alpha;n_x, n_y, 0})^2 + \\ & + (u_{\alpha;n_x, n_y, 0} - u_{\alpha;n_x+1, n_y, 0})^2 + (u_{\alpha;n_x, n_y, 0} - u_{\alpha;n_x-1, n_y, 0})^2 + \\ & + (u_{\alpha;n_x, n_y, 0} - u_{\alpha;n_x, n_y+1, 0})^2 + (u_{\alpha;n_x, n_y, 0} - u_{\alpha;n_x, n_y-1, 0})^2 + \\ & + (u_{\alpha;n_x, n_y, N_z} - u_{\alpha;n_x+1, n_y, N_z})^2 + (u_{\alpha;n_x, n_y, N_z} - u_{\alpha;n_x-1, n_y, N_z})^2 + \\ & + (u_{\alpha;n_x, n_y, N_z} - u_{\alpha;n_x, n_y+1, N_z})^2 + (u_{\alpha;n_x, n_y, N_z} - u_{\alpha;n_x, n_y-1, N_z})^2] \end{aligned} \quad (4.10)$$

a izraz za "zapreminski" hamiltonijan kao:

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

$$\begin{aligned}
& + \left( u_{\alpha; n_x, n_y+1, n_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z} \right)^2 + \left( u_{\alpha; n_x, n_y-1, n_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z} \right)^2 \Big] + \quad (4.11) \\
& + \sum_{n_z=2}^{N_z-2} \left[ \left( u_{\alpha; n_x, n_y, n_z+1} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z} \right)^2 + \left( u_{\alpha; n_x, n_y, n_z-1} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z} \right)^2 \right] + \\
& + \left( u_{\alpha; n_x, n_y, N_z-1} - u_{\alpha; n_x, n_y, N_z-2} \right)^2 + \left( u_{\alpha; n_x, n_y, 1} - u_{\alpha; n_x, n_y, 2} \right)^2 \Big\}
\end{aligned}$$

Zakon disperzije fonona i u ovom slučaju potražićemo, kao i u prethodnom paragrafu, metodom Grinovih funkcija tražeći Grinovu funkciju istog oblika kao i (4.3) pomoću jednačine (4.4). Za razliku od (jednostavnije) situacije za idealne strukture, ovde moramo posebno odrediti Grinove funkcije i izračunati komutatore za atome graničnih slojeva, a posebno za unutrašnjost filma. Koristeći već navedene standardne komutacione relacije izračunaćemo odgovarajuće komutatore.

Za donju graničnu površinu ( $n_z = 0$ ):

$$\begin{aligned}
\left[ p_{\beta; m_x, m_y, 0}, H \right] &= \left[ p_{\beta; m_x, m_y, 0}, H_P \right] = \\
&= -i\hbar C_{\beta\beta} \left( 6u_{\beta; m_x, m_y, 0} - u_{\beta; m_x, m_y, 1} - u_{\beta; m_x-1, m_y, 0} - \right. \\
&\quad \left. - u_{\beta; m_x+1, m_y, 0} - u_{\beta; m_x, m_y+1, 0} - u_{\beta; m_x, m_y-1, 0} \right)
\end{aligned}$$

Za  $1 \leq n_z \leq N_z - 1$  na isti način dobijamo:

$$\begin{aligned}
\left[ p_{\beta; m_x, m_y, m_z}, H \right] &= \left[ p_{\beta; m_x, m_y, m_z}, H_Z \right] = \\
&= -i\hbar C_{\beta\beta} \left( 6u_{\beta; m_x, m_y, m_z} - u_{\beta; m_x+1, m_y, m_z} - u_{\beta; m_x-1, m_y, m_z} - \right. \\
&\quad \left. - u_{\beta; m_x, m_y+1, m_z} - u_{\beta; m_x, m_y-1, m_z} - u_{\beta; m_x, m_y, m_z+1} - u_{\beta; m_x, m_y, m_z-1} \right);
\end{aligned}$$

Konačno za  $n_z = N_z$  potpuno istim postupkom sledi:

$$\begin{aligned}
\left[ p_{\beta; m_x, m_y, N_z}, H \right] &= \left[ p_{\beta; m_x, m_y, N_z}, H_P \right] = \\
&= -i\hbar C_{\beta\beta} \left( 6u_{\beta; m_x, m_y, N_z} - u_{\beta; m_x-1, m_y, N_z} - u_{\beta; m_x+1, m_y, N_z} - \right. \\
&\quad \left. - u_{\beta; m_x, m_y-1, N_z} - u_{\beta; m_x, m_y+1, N_z} - u_{\beta; m_x, m_y, N_z-1} \right)
\end{aligned}$$

Zamenom navedenih komutatora u jednačinu (4.4) dobijamo:

- za  $n_z = 0$

$$\begin{aligned}
-M\omega^2 G_{n_x, n_y, 0; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha} &= -\frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{n_x, m_x} \delta_{n_y, m_y} \delta_{0, m_z} - C_{\alpha\alpha} \left( 6G_{n_x, n_y, 0; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha} - \right. \\
&\quad \left. - G_{n_x+1, n_y, 0; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha} - G_{n_x-1, n_y, 0; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha} - G_{n_x, n_y+1, 0; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha} - \right) \quad (4.12)
\end{aligned}$$

$$-G_{n_x, n_y-1, 0; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha} - G_{n_x, n_y, +1; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha})$$

- za  $1 \leq n_z \leq N_z - 1$

$$\begin{aligned} -M\omega^2 G_{n_x, n_y, n_z; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha} &= -\frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{n_x, m_x} \delta_{n_y, m_y} \delta_{n_z, m_z} - C_{\alpha\alpha} \left( 6G_{n_x, n_y, n_z; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha} - \right. \\ &- G_{n_x+1, n_y, n_z; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha} - G_{n_x-1, n_y, n_z; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha} - G_{n_x, n_y+1, n_z; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha} - \\ &\left. - G_{n_x, n_y-1, n_z; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha} - G_{n_x, n_y, n_z+1; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha} - G_{n_x, n_y, n_z-1; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha} \right) \end{aligned} \quad (4.13)$$

- za  $n_z = N_z$

$$\begin{aligned} -M\omega^2 G_{n_x, n_y, N_z; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha} &= -\frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{n_x, m_x} \delta_{n_y, m_y} \delta_{N_z, m_z} - C_{\alpha\alpha} \left( 6G_{n_x, n_y, N_z; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha} - \right. \\ &- G_{n_x+1, n_y, N_z; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha} - G_{n_x-1, n_y, N_z; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha} - G_{n_x, n_y+1, N_z; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha} - \\ &\left. - G_{n_x, n_y-1, N_z; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha} - G_{n_x, n_y, N_z-1; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha} \right) \end{aligned} \quad (4.14)$$

Primenom delimične Furije transformacije (zbog narušenja translacione simetrije samo duž z-pravaca):

$$G_{n_x, n_y, n_z; m_x, m_y, m_z}^{\alpha\alpha}(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{k_x, k_y} e^{-ia[(n_x-m_x)k_x + (n_y-m_y)k_y]} G_{n_x, m_z}^{\alpha}(k_x, k_y; \omega)$$

na sistem jednačina (4.12 - 14), te nakon neznatnih algebarskih transformacija, on prelazi u:

$$\begin{aligned} \varrho_k G_{0, m_z}^{\alpha} + G_{1, m_z}^{\alpha} &= \mathcal{K} \delta_{0, m_z}, \\ G_{0, m_z}^{\alpha} + \varrho_k G_{1, m_z}^{\alpha} + G_{2, m_z}^{\alpha} &= \mathcal{K} \delta_{1, m_z}, \\ G_{1, m_z}^{\alpha} + \varrho_k G_{2, m_z}^{\alpha} + G_{3, m_z}^{\alpha} &= \mathcal{K} \delta_{2, m_z}, \\ \dots & \\ G_{n_z-1, m_z}^{\alpha}(k_z) + \varrho_k G_{n_z, m_z}^{\alpha} + G_{n_z+1, m_z}^{\alpha} &= \mathcal{K} \delta_{n_z, m_z}, \\ \dots & \\ G_{N_z-3, m_z}^{\alpha} + \varrho_k G_{N_z-2, m_z}^{\alpha} + G_{N_z-1, m_z}^{\alpha} &= \mathcal{K} \delta_{N_z-2, m_z}, \\ G_{N_z-2, m_z}^{\alpha} + \varrho_k G_{N_z-1, m_z}^{\alpha} + G_{N_z, m_z}^{\alpha} &= \mathcal{K} \delta_{N_z-1, m_z}, \\ G_{N_z-1, m_z}^{\alpha} + \varrho_k G_{N_z, m_z}^{\alpha} &= \mathcal{K} \delta_{N_z, m_z}. \end{aligned} \quad (4.15)$$

gde je:

$$\varrho_k = \frac{\omega^2}{\Omega_{\alpha}^2} - 4 \sin^2 \frac{ak_x}{2} - 4 \sin^2 \frac{ak_y}{2} - 2. \quad (4.16)$$

Ovaj sistem od  $N_z + 1$  nehomogenih jednačina ima netrivialna rešenja, data u obliku razlomka čiji je imenilac determinanta tog sistema. Prema tome, energije nalazimo iz polova, tj. iz tačaka u kojima je ona identički jednaka nuli:

$$D_{N_z+1}(\varrho) = \begin{vmatrix} \varrho & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & \varrho & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \varrho & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & \ddots & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & \varrho & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & \varrho & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & \varrho \end{vmatrix}, \quad \varrho \equiv \varrho_{\alpha, \vec{k}}.$$

Ako ovu determinante tražimo uz oblik

$$\varrho \equiv \varrho_k = 2 \cos \zeta_{\nu_z}; \quad k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}; \quad \nu_z = 1, 2, 3, \dots, N_z + 1. \quad (4.17)$$

koji daje tzv. zapreminska stanja u obliku stojećih talasa, onda determinanta uzima jedan od oblika Čebiševljevih polinoma druge vrste i može se pisati u obliku:

$$D_{N_z+1}(\varrho) = \frac{\sin[(N_z + 2)\zeta_{\nu_z}]}{\sin \zeta_{\nu_z}}; \quad \zeta_{\nu_z} \neq 0, \quad (4.18)$$

Izjednačavajući oblik determinante (4.18) sa nulom, dobijamo:

$$\zeta_{\nu_z} = \frac{\pi \nu_z}{N_z + 2}. \quad (4.19)$$

Zamenom izraza (4.18) i (4.19) u (4.16), te rešavanjem te jednačine po  $\omega$  dobija se:

$$\omega_{\alpha}(k_x, k_y, \nu_z) = 2\Omega_{\alpha} \sqrt{\sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y}{2} + \cos^2 \frac{\pi \nu_z}{2(N_z + 2)}}, \quad (4.20)$$

Nakon izmene indeksa  $\mu_z = N_z + 2 - \nu_z$  ova formula dobija simetričan oblik:

$$\omega_{\alpha}(\vec{k}) = 2\Omega_{\alpha} \sqrt{\sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y}{2} + \sin^2 \frac{ak_z}{2}}, \quad (4.21)$$

pri čemu je:

$$k_z = \frac{\pi}{a} \frac{\mu_z}{N_z + 2}; \quad \mu_z = 1, 2, 3, \dots, N_z + 1 \quad (4.22)$$

Uočava se da, za razliku od  $k_x$  i  $k_y$  čija je minimalna vrednost jednaka nuli,

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

jer je  $N_z \ll (N_x, N_y)$ .

Konačno, zakon disperzije za fonone u tankom nedeformisanom filmu na osnovu (4.21) i (4.22) je:

$$E_\alpha(\vec{k}) = \hbar\omega_\alpha(\vec{k}) = 2E_o \sqrt{\sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y}{2} + \sin^2 \frac{ak_z}{2}}, \quad (4.23)$$

gde je  $E_o = \hbar\Omega_\alpha$ .

Upoređujući dobijene rezultate sa odgovarajućim idealnim beskonačnim strukturama može se zaključiti da sve tri akustičke frekvencije u masivnim strukturama teže nuli kada  $k$  teži nuli, dok su, sa druge strane, minimalne frekvencije u tankom filmu date kao:

$$\omega_\alpha^{\min}(k_x, k_y, k_z) \equiv \omega_\alpha(k_x = k_y = 0, k_z = k_z^{\min}) = 2\Omega_\alpha \sin \left[ \frac{\pi}{2(N_z + 2)} \right] \neq 0. \quad (4.24)$$

To znači da fononi u tankim filmovima poseduju fononski gep  $\hbar\omega_\alpha^{\min}$ . Na osnovu čega se može odrediti aktivaciona temperatura fonona u filmu:

$$T_{ac} = \frac{\hbar\omega_\alpha^{\min}}{k_B} = \frac{2\hbar}{k_B} \Omega_\alpha \sin \left[ \frac{\pi}{2(N_z + 2)} \right], \quad (4.25)$$

tj. temperatura neophodna za eksitaciju fonona data gornjim izrazom ima konačnu pozitivnu vrednost.

Vidi se da aktivaciona temperatura opada sa povećanjem debljine filma, tj. sa porastom  $N_z$ . Za izuzetno tanke filmove aktivaciona temperatura je relativno visoka. Na osnovu ove činjenice viša superprovodna kritična temperatura u filmovima mogla bi biti objašnjena npr. time da se do  $T_{ac}$  film ponaša kao apsolutno "zamrznuta" struktura i sve dok se ne postigne ta temperatura u sistemu nisu prisutni realni fononi. Jasno je da bi se elektroni, sve do ovih temperatura, u tankoj strukturi mogli kretati bez trenja, tj. bezotporno.

Prema tome, prisustvo fononskog gema i odgovarajuće aktivacione temperature za pobuđivanje fonona predstavlja možda moguće objašnjenje činjenice da tanki filmovi imaju višu kritičnu temperaturu nego masivne idealne beskonačne strukture.



## 5. ZAKLJUČAK

Ispitujući i upoređujući fononske spektre u idealnim i film-strukturama došli smo do sledećih zaključaka.

1. Sve tri akustičke frekvencije u masivnim strukturama teže nuli kad  $\vec{k} \rightarrow 0$ , dok u tankom filmu teže nekoj minimalnoj vrednosti koja zavisi od debljine filma. To znači da fononi u tankim strukturama poseduju energetski gep. Za njihovo pobuđivanje treba uložiti energiju ili ih zagrevati do određene aktivacione temperature  $T_{ac}$ , što znači da se sistem do  $T_{ac}$  ponaša kao "zamrznut", tj. fononi nisu prisutni.

2. Nesumnjivo se može zaključiti da su ove analize pokazale da su filmovi bolji superprovodnici od odgovarajućih masivnih uzoraka, koji su napravljeni od istog materijala i iste kristalne strukture. Ova opitna činjenica je potkrepljena sledećim rezultatima.

Pojava energetskog gepa u fononskom spektru film - struktura znači da se sve do aktivacione temperature  $T_{ac}$  ovi sistemi ponašaju kao zamrznuti, bez mehaničkih vibracija koji bi stvarali otpor provođenju električne struje.

Svi ovi zaključci su kvalitativne prirode i odnose se na promenu fononskih stanja i spektra pod uticajem prisustva granica strukture, kao i mogući uticaj tih promena na fizičke karakteristike sistema. Zbog toga što su uračunati samo fononski uticaji, ne mogu se smatrati konačnim.

Nastavak istraživanja treba da ispita uticaj granica na spektre i stanja drugih elementarnih pobuđenja i nosilaca naelektrisanja i na njihovu interakciju u prisustvu izmenjenog fononskog polja. Na osnovu takvih rezultata moći će nešto konkretnije da se kaže o veličinama superprovodnih karakteristika film - struktura.

## 6. Literatura

- [1] B.S.Tošić, *Statistička fizika*, PMF IF, Novi Sad 1978.
- [2] A.S.Davydov, *Teoriya tverdogo tela*, Nauka, Moskva 1976.
- [3] L.I.Šif, *Kvantna mehanika*, V.Karadžić, Beograd 1968.
- [4] Ch.Kittel, *Uvod u fiziku čvrstog stanja*, Sav.Admin. Beograd 1970.
- [5] M.I.Kaganov, *Elektrony, fonony, magnony*, Nauka, Moskva 1979.
- [6] M.Pantić, *Fononska stanja u strukturama sa narušenom simetrijom*, Mr teza, FF PMF Beograd 1993.
- [7] B.S.Tošić, J.P.Šetrajić, D.Lj.Mirjanić, Z.V.Bundalo, *Physica A* 184 (1992) 354.