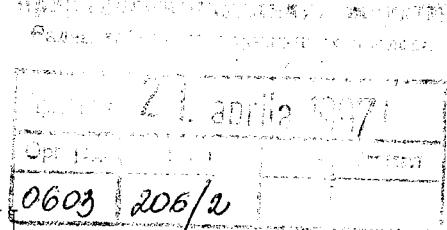


f1-27

UNIVERZITET U NOVOM SADU
Prirodno-matematički fakultet



Mr. Svetislav B. Lazarev

**Teorijska istraživanja
električnih i magnetnih svojstava
tankih filmova**

Doktorska disertacija

Novi Sad, 1997.

„Bez nauke nema muke”
Nebojša Lazarev (IIa)

Zahvalnosti

Ova disertacija je urađena na Institutu za fiziku Prirodno-matematičkog fakulteta u Novom Sadu, pod mentorstvom dr J. Šetrajčića.

Rukovodiocu disertacije, dr J. Šetrajčiću, najiskrenije zahvaljujem na prijateljskoj saradnji, mnogobrojnim diskusijama i stalnoj podršci tokom njene izrade.

Prof. B. Tošić je predložio teorijski metod koji se ovde koristi u analizi fonona i elektrona u tankim filmovima, pomagao u njegovoј primeni i interpretaciji dobijenih rezultata, pa mu ovom prilikom izražavam duboku zahvalnost.

Prof. M. Škrinjaru se zahvaljujem na veoma korisnoj saradnji kod analize magnetnih svojstava tankih filmova.

Prof. D.Kaporu se zahvaljujem na mnogobrojnim diskusijama i nesebičnoj pomoći pri publikovanju radova iz ove disertacije.

Mr M. Pantiću se zahvaljujem na strpljivoj saradnji i mnogobrojnim diskusijama u toku zajedničkog rada.

Na pomoći pri izradi disertacije takođe se zahvaljujem: dr S. Stojanoviću, kao i dr Z. Radoviću, dr N. Švrakiću, dr Lj. Ristovskom i dr Z. Popoviću.

Mom prijatelju i kolegi mr S. Markovskom se zahvaljujem što je pomogao da uspostavim saradnju sa Institutom za fiziku u Novom Sadu.

Konačno, veliku zahvalnost dugujem i mojoj porodici na strpljivoj podršci i velikom razumevanju, o čemu svedoči i gore citirani lapsus mog sina Nebojše.

Ovaj rad je posvećen mojoj deci.

Svetislav,

Klenak 1997.

Sadržaj

1	UVOD	3
2	KVANTNA TEORIJA ČVRSTOG STANJA	4
2.1	Metod Grinovih funkcija	4
2.1.1	Teorija linearog odziva i Grinove funkcije	4
2.1.2	Grinove funkcije i korelace ione funkcije	7
2.1.3	Osobine Grinovih funkcija	10
2.2	Ravnotežna svojstva idealnih kristala	12
2.2.1	Harmonijsko oscilovanje kristalne rešetke	12
2.2.2	Elektroni u beskonačnom kristalu	19
2.2.3	Hajzenbergov feromagnet sa bikvadratnom interakcijom	23
3	TERMODINAMIKA TANKIH FILMOVA	26
3.1	Fononi u tankim filmovima	26
3.2	Osnovne prepostavke. Hamiltonijan modela	28
3.3	Proračun fononskih Grinovih funkcija	31
3.4	Fononski spektri	37
3.4.1	Zapreminska fononska stanja	37
3.4.2	Površinska fononska stanja	40
3.5	Lokalne gustine stanja i Debajeva frekvencija	42
3.6	Dinamička svojstva atoma u tankim filmovima	45
3.6.1	Srednji kvadrati pomeraja	45
3.6.2	Srednji kvadrati brzina	48
3.7	Specifična toplota kristalnih filmova	50



4 ELEKTRIČNA SVOJSTVA TANKIH FILMOVA	53
4.1 Elektroni u tankim filmovima	53
4.2 Elektronski hamiltonijan	55
4.3 Proračun elektronskih Grinovih funkcija	57
4.4 Elektronski spektri tankih filmova	60
4.4.1 Zakon disperzije i zapreminska stanja	60
4.4.2 Površinska elektronska stanja	63
4.5 Lokalne gustine stanja i Fermijeva energija	66
4.6 Termodinamička svojstva sistema elektrona	69
4.7 Oscilatorno ponašanje svojstava tankih filmova	71
4.7.1 Oscilovanje Fermijeve energije i specifične topote	71
4.7.2 Oscilovanje energetskog gепа	73
5 MAGNETNA SVOJSTVA TANKIH FILMOVA	76
5.1 Fizičko poreklo i značaj bikvadratne interakcije	76
5.2 Hamiltonijan modela. Osnovne jednačine	78
5.3 Termomagnetna svojstva tankih filmova	81
5.3.1 Kritična temperatura	81
5.3.2 Parametri uređenosti	83
5.3.3 Specifična topota	87
5.4 Magnonski spektri	89
5.4.1 Zakon disperzije	89
5.4.2 Zapreminske magnoni	92
5.4.3 Spektar površinskih magnona	93
5.5 Analiza faznih prelaza	95
6 ZAKLJUČAK	99
A DODATAK	101
A.1 Karakteristični polinomi	101
A.2 Lokalizovane eksitacije u polimernom lancu	105
A.2.1 Hamiltonijan sistema i eksitonske energije	105
A.2.2 Numerički rezultati i diskusija	108
A.3 Eksitonske koncentracije u tankim filmovima	111
A.3.1 Eksitonske Grinove funkcije za tanke filmove	111
A.3.2 Spektri eksitona i njihova prostorna distribucija	114
LITERATURA	117

God made solids, but surfaces were the work of the Devil.
Wolfgang Pauli

1 UVOD

Teorijska i eksperimentalna istraživanja osobina niskodimenzionih sistema,¹ a pre svega tankih filmova postala su u poslednjoj deceniji veoma intenzivna pa bi se moglo reći da predstavljaju jedan od udarnih pravaca istraživanja u savremenoj fizici kondenzovane materije. Razlozi zbog kojih interesovanje za tanke filmove raste su mnogostruki, ali ipak treba izdvojiti sledeća tri.

Novi visokotemperaturski superprovodnici koji su otkriveni pre desetak godina predstavljaju slojevite strukture tj. one su skup slabo interagujućih tankih filmova. Logično je prepostaviti da se u fizičkim karakteristikama tankih filmova kriju koreni visokotemperaturske superprovodljivosti.

Drugi razlog naraslog interesovanja za tanke filmove je nagli razvoj tehnike sintetizovanja ovih struktura. Danas se bez većih teškoća mogu napraviti tanki filmovi sa svega nekoliko atomskih slojeva.

Treći razlog je takođe izazvan tehnološkim napretkom. Novije eksperimentalne tehnike, a pre svega epitaksija molekulskim snopom, izvanredno su usavršene tako da parametre strukture možemo menjati po volji, naravno u svemu onom što je interesantno i korisno.

U disertaciji je preduzeto niz teorijskih istraživanja tankih filmova sa ciljem da se pronađu uslovi pod kojima filmovi postaju bolji superprovodnici ili bolji akustički izolatori od postojećih. Zbog toga su ispitivane i mehaničke i električne i magnetne osobine ovih struktura. Posebna pažnja u svim pomenutim slučajevima posvećena je uticaju graničnih uslova na fizičko ponašanje tankih filmova. Teorijski su birani takvi granični uslovi koji mogu da poprave provodne i superprovodne karakteristike tankih filmova, kao i da poboljšaju akustičku izolaciju. Što se magnetnih osobina tiče analiziran je uticaj bikvadratne interakcije i graničnih uslova na termomagnetsna svojstva i fazne prelaze magnetnih materijala. Istraživanja tankih filmova vršena su metodom Grinovih funkcija. Ovaj metod, iako računski složeniji od uobičajenog prilaza u kome se ispituje jednočestićna talasna funkcija, daje pored dinamičkih karakteristika (zakon disperzije i drugo) i termodinamičke karakteristike filma. Preko Grinove funkcije se mogu izračunati srednje vrednosti fizičkih veličina i na taj način povezati mikro i makro svojstva tankih filmova.

Plan istraživanja u disertaciji je sledeći. Prvo su izloženi elementi opšte teorije mehaničkih oscilacija, slobodnih elektrona i spinskih talasa u masivnim, idealnim strukturama. Za filmove su ispitane mehaničke i termodinamičke karakteristike, zatim električne i na kraju magnetne. Poznati rezultati za masivne strukture su upoređeni sa odgovarajućim rezultatima za filmove sa ciljem da se odredi šta novo daju filmovi u odnosu na masivnu strukturu.

¹Pored tankih filmova tu spadaju superrešetke, kvantne žice i kvantne tačke.

2 KVANTNA TEORIJA ČVRSTOG STANJA

Pre nego što predemo na teorijska istraživanja električnih i magnetnih svojstava tankih filmova, u ovom poglavlju ćemo izložiti metod Grinovih funkcija i ilustrovati njegovu primenu na primeru idealnog kristala².

Metod dvovremenskih temperaturskih Grinovih funkcija [1 – 7], danas se veoma često koristi u kvantnoj teoriji čvrstog stanja. Zahvaljujući ugrađenoj statistici, taj metod se uspešno primenjuje kod izračunavanja kako mikroskopskih tako i makroskopskih, ravnotežnih i neravnotežnih svojstava kristala [8 – 17]. Ukoliko je kristal idealan, odnosno translaciono invarijantan, mogu se primeniti Born - Karmanovi periodični granični uslovi što značajno olakšava proračune. Kod tankih filmova, međutim, prisustvo granica dovodi do narušenja translacione invarijantnosti tako da se periodični granični uslovi ne mogu u potpunosti primeniti [18, 19]. Primena metoda Grinovih funkcija u tom slučaju zahteva pre svega njihovu redefiniciju [20, 21]. Pored toga potrebno je razviti specifične metode za njihovo izračunavanje što nužno dovodi do primene numeričkih procedura [22, 23] koje se mogu realizovati jedino uz pomoć računara [24]. Konačno, kod tankih filmova je potrebno uvesti i određene relacije neophodne za izračunavanje ravnotežnih svojstava kristalnih filmova.

Metodom Grinovih funkcija u ovom poglavlju ćemo analizirati harmonijsko oscilovanje kristalne rešetke [13], degenerisani elektronski gas u kristalu [14] i Heisembergov feromagnet sa bikvadratnom interakcijom [25]. Svi rezultati će biti dovedeni do takvog oblika koji će omogućiti kasnije poređenje sa odgovarajućim rezultatima za tanke filmove.

2.1 Metod Grinovih funkcija

2.1.1 Teorija linearног odziva i Grinove funkcije

Iz opšte teorije linearног odziva [1] poznato je da se dvovremenske Grinove funkcije prirodno pojavljuju kod analize reakcije termodinamičkog sistema na slabu spoljašnju perturbaciju. Za očekivati je da se ova teorija može primeniti i kod tankih kristalnih filmova. Pri tome se mora uzeti u obzir da je takav kristal prostorno ograničen i da se fizički uslovi na granicama razlikuju od uslova u njegovoј unutrašnjosti. To svakako znači da je translaciona simetrija narušena duž jednog pravca koji je normalan na granične površine filma. Translaciona simetrija je očuvana u slojevima filma koji su paralelni sa njegovim graničnim površinama. Zbog ovih specifičnosti kristalne strukture i prisustva granica, potrebno je pre svega redefinisati Grinove funkcije za tanke filmove. Radi jednostavnosti prepostavimo da se radi o tetragonalnoj strukturi sa konstantama rešetke $\{a_x, a_y, a_z\}$. Ako je translaciona simetrija narušena u pravcu z -ose, tada indeks sloja ima vrednosti u intervalu $n_z \in [0, N_z]$, dok indeksi čvorova u slojevima filma, u XY ravnima, imaju vrednosti:

$$n_{x/y} \in \begin{cases} \left[-\frac{1}{2}N_{x/y} + 1, \frac{1}{2}N_{x/y} \right] & N_{x/y} - \text{parno} \\ \left[-\frac{1}{2}(N_{x/y} - 1), \frac{1}{2}(N_{x/y} + 1) \right] & N_{x/y} - \text{neparno} \end{cases}$$

²Pod idealnim kristalom („balk”) podrazumeva se beskonačan kristal bez primesa i granica.

Broj slojeva očigledno iznosi $N_z + 1$, a ukupan broj čvorova u filmu je $N_x N_y (N_z + 1)$.

Sada ćemo pokazati da se linearne reakcije takvih sistema na spoljašnju perturbaciju može izraziti pomoću odgovarajućih dvovremenskih Grinovih funkcija. Obično se pretpostavlja da je pri $t \rightarrow -\infty$ sistem u ravnotežnom početnom stanju kada je opisan vremenski nezavisnim hamiltonijanom H_0 i matricom gustine ϱ_0 ,

$$\varrho_0 = Q^{-1} e^{-H_0/\theta}, \quad Q = \text{Tr} \{ e^{-H_0/\theta} \}, \quad \text{Tr} \{ \varrho_0 \} = 1 \quad (2.1)$$

gde je $\theta = k_B T$ - absolutna temperatura izražena u energetskim jedinicama.

Neka na sistem deluje vremenski zavisna perturbacija oblika:

$$H_1 = \sum_{\vec{m}} A_{\vec{m}} f_{\vec{m}}(t) \quad (2.2)$$

pri čemu je sa $f(t)$ - označena spoljašnja generalisana „sila” a sa A - operator odgovarajućeg „pomeraja”. Na primer, ako $A_{\vec{m}}$ predstavlja magnetni dipolni moment na čvoru \vec{m} , tada je $f_{\vec{m}}(t)$ vrednost jačine spoljašnjeg magnetnog polja na istom čvoru. Adijabatsko uključenje perturbacije (2.2) dovodi do promene srednje vrednosti dinamičke veličine B na svakom čvoru. Prema definiciji [3]:

$$\langle B_{\vec{n}}(t) \rangle = \text{Tr} \{ \varrho B_{\vec{n}}(t) \} \quad (2.3)$$

gde je ϱ - matrica gustine perturbovanog sistema koja zadovoljava jednačinu kretanja,

$$i\hbar \frac{d}{dt} \varrho = [H_0 + H_1, \varrho] \quad (2.4)$$

uz početni uslov $\varrho|_{t=-\infty} = \varrho_0$. Smatrujući da je perturbacija mala, rešenje jednačine (2.4) možemo formalno napisati u obliku:

$$\varrho = \varrho_0 + \varrho_1, \quad \varrho_1|_{t=-\infty} = 0. \quad (2.5)$$

Uvrštavajući (2.5) u jednačinu (2.4) dobijamo

$$i\hbar \frac{d}{dt} \varrho_1 = [H_0, \varrho_1] + [H_1, \varrho_0] \quad (2.6)$$

pri čemu je uzeto u obzir da ravnotežna matrica gustine ne zavisi od vremena tj. da je $[H_0, \varrho_0] = 0$ i da je perturbacija mala, odnosno: $[H_1, \varrho_0] \sim \mathcal{O}(H_1^2) \approx 0$.

Nakon prelaza na reprezentaciju međudelovanja transformacijama,

$$H_1(t) = e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} H_1 e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t}; \quad \varrho_1(t) = e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} \varrho_1 e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t}, \quad (2.7)$$

jednačina kretanja (2.6) postaje jednostavnija,

$$i\hbar \frac{d}{dt} \varrho_1(t) = [H_1(t), \varrho_0]. \quad (2.8)$$

Rešenje ove jednačine, uz poznate početne uslove, može se napisati kao:

$$\varrho_1(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' [H_1(t'), \varrho_0]. \quad (2.9)$$

tako da je:

$$\varrho_1 = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t'} [H_1(t'), \varrho_0] e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t'} \quad (2.10)$$

Na taj način, promena srednje vrednosti operatora B na čvoru \vec{n} , tj. lokalni odziv sistema na spoljašnju perturbaciju iznosi:

$$\Delta \langle B_{\vec{n}}(t) \rangle \equiv \langle B_{\vec{n}}(t) \rangle - \langle B_{\vec{n}} \rangle = \int_{-\infty}^t dt' \text{Tr} \{ [H_1(t'), \varrho_0] B_{\vec{n}}(t') \}, \quad (2.11)$$

gde je $\langle B_{\vec{n}} \rangle = \text{Tr} \{ \varrho_0 B_{\vec{n}} \}$ - ravnotežna srednja vrednost.

Koristeći svojstva invarijantnosti traga na cikličnu permutaciju operatora, izraz za linearne odzive dobija oblik:

$$\Delta \langle B_{\vec{n}}(t) \rangle = \frac{1}{i\hbar} \sum_{\vec{m}} \int_{-\infty}^t dt' \langle [B_{\vec{n}}(t), A_{\vec{m}}(t')] \rangle f_{\vec{m}}(t'). \quad (2.12)$$

Dalje, koristeći jediničnu step funkciju,

$$\Theta(t) = \begin{cases} 1, & t > 0 \\ 0, & t < 0 \end{cases}$$

vidimo da se u teoriji linearne odzive kod kristalnih struktura, prirodno pojavljuju dvovremenske, retardovane, komutatorske Grinove funkcije koje su definisane za svaki par čvorova (\vec{n}, \vec{m}) ,

$$G_{\vec{n}, \vec{m}}^{ret}(t, t') \equiv \langle \langle B_{\vec{n}}(t) | A_{\vec{m}}(t') \rangle \rangle^{ret} = \Theta(t - t') \langle [B_{\vec{n}}(t), A_{\vec{m}}(t')] \rangle \quad (2.13)$$

Pomoću tako uvedene Grinove funkcije, jednačina (2.12) konačno postaje:

$$\Delta \langle B_{\vec{n}}(t) \rangle = \frac{1}{i\hbar} \sum_{\vec{m}} \int_{-\infty}^t dt' G_{\vec{n}, \vec{m}}^{ret}(t, t') f_{\vec{m}}(t'). \quad (2.14)$$

Specijalno, ako je perturbacija izazvana na čvoru \vec{m} u trenutku t_0 , oblika:

$$H_1(t') = A_{\vec{m}} \delta(t' - t_0)$$

tada je reakcija sistema na čvoru \vec{n} u kasnjem trenutku $t > t_0$:

$$\Delta \langle B_{\vec{n}}(t) \rangle = \frac{1}{i\hbar} G_{\vec{n}, \vec{m}}^{ret}(t, t_0) \quad (2.15)$$

određena Grinovom funkcijom operatora $B_{\vec{n}}(t)$ i $A_{\vec{m}}(t_0)$. Poslednja relacija ukazuje na fizički smisao Grinovih funkcija.

Napomenimo da se pored retardovane Grinove funkcije, u teoriji kondenzovane materije koristi i avansovana Grinova funkcija:

$$G_{\vec{n}, \vec{m}}^{adv}(t, t') = -\Theta(t' - t) \langle [B_{\vec{n}}(t), A_{\vec{m}}(t')] \rangle \quad (2.16)$$

koja je sa njom povezana očiglednom relacijom:

$$\langle\langle B_{\vec{n}}(t) \mid A_{\vec{m}}(t') \rangle\rangle^{ret} = \langle\langle A_{\vec{m}}(t') \mid B_{\vec{n}}(t) \rangle\rangle^{adv} \quad (2.17)$$

Takođe, zbog teškoća koje se pojavljuju kod direktnog izračunavanja retardovanih Grinovih funkcija, danas se veoma često koriste i temperaturske ili Macubara Grinove funkcije [15]. U ovom radu se isključivo koriste retardovane Grinove funkcije jer one najdirektnije određuju mikroskopska i makroskopska svojstva kristalnih struktura. Napomenimo i to da se primenjuje Tjablikova [2] definicija Grinove funkcije iako se danas obično koristi Zubarjeva [1] definicija.

2.1.2 Grinove funkcije i korelacione funkcije

U prethodnom odeljku smo videli da se prilikom izračunavanja linearne odzive kristala na spoljašnju perturbaciju pojavljuju retardovane Grinove funkcije u svojoj komutatorskoj formi. Pored komutatorskih, postoje i antikomutatorske Grinove funkcije koje su pogodne kada se ispituju osobine fermionskih sistema. Prema tome, retardovane Grinove funkcije se definišu pomoću zbiru ili razlike („+“ fermioni, „-“ bozoni)

$$G_{\vec{n},\vec{m}}^{ret}(t,t') = \Theta(t,t') \{ \langle B_{\vec{n}}(t) | A_{\vec{m}}(t') \rangle \pm \langle A_{\vec{m}}(t') | B_{\vec{n}}(t) \rangle \} , \quad (2.18)$$

tzv. vremenskih korelacionih funkcija,

$$\langle B_{\vec{n}}(t) | A_{\vec{m}}(t') \rangle = \text{Tr} \{ \varrho | B_{\vec{n}}(t) | A_{\vec{m}}(t') \} , \quad (2.19)$$

pri čemu su operatori $A_{\vec{m}}$ i $B_{\vec{n}}$ dati u Hajzenbergovoj reprezentaciji:

$$B_{\vec{n}}(t) = e^{\frac{i}{\hbar} H t} B_{\vec{n}} e^{-\frac{i}{\hbar} H t} ; \quad A_{\vec{m}}(t') = e^{\frac{i}{\hbar} H t'} A_{\vec{m}} e^{-\frac{i}{\hbar} H t'}$$

Za razliku od Grinovih funkcija, korelacione funkcije su definisane i za $t = t'$. U tom slučaju se radi o srednjim vrednostima dinamičkih promenljivih pomoću kojih se mogu opisati ravnotežna svojstva kristala [10]. Neravnotežni procesi u kristalima [15], kao što su transportni i relaksacioni, se takođe mogu opisati pomoću korelacionih funkcija, pri $t \neq t'$. Prema tome, osnovni zadatak kvantne teorije čvrstih tela i jeste izračunavanje različitih korelacionih funkcija. One se najčešće računaju posredno, tako što se najpre izračunavaju Grinove funkcije pomoću odgovarajućih jednačina kretanja. Pri tom je potrebno znati vezu korelacionih funkcija sa Grinovim funkcijama. Odeđivanje ove veze omogućavaju sledeća dva svojstva korelacionih funkcija.

Pre svega, polazeći od definicije (2.19) i koristeći svojstvo komutativnosti operatora $e^{-H/\theta}$ i $e^{-iHt'/\hbar}$ kao i ciklična svojstva proizvoda pod znakom traga, dobijamo:

$$\begin{aligned} \langle B_{\vec{n}}(t) | A_{\vec{m}}(t') \rangle &= \text{Tr} \left\{ \varrho_0 e^{\frac{i}{\hbar} H t} B_{\vec{n}} e^{-\frac{i}{\hbar} H t} e^{\frac{i}{\hbar} H t'} A_{\vec{m}} e^{-\frac{i}{\hbar} H t'} \right\} = \\ &= \text{Tr} \left\{ e^{-\frac{i}{\hbar} H t'} \varrho_0 e^{\frac{i}{\hbar} H t} B_{\vec{n}} e^{-\frac{i}{\hbar} H(t-t')} A_{\vec{m}} \right\} = \text{Tr} \left\{ \varrho_0 e^{\frac{i}{\hbar} H(t-t')} B_{\vec{n}} e^{-\frac{i}{\hbar} H(t-t')} A_{\vec{m}} \right\} \end{aligned}$$

To znači da u ravnotežnom stanju, kada H ne zavisi eksplicitno od vremena, i korelaciona i Grinova funkcija zavise jedino od razlike vremenskih argumenata $(t - t')$, tj.

$$\langle B_{\vec{n}}(t) | A_{\vec{m}}(t') \rangle = \langle B_{\vec{n}}(t - t') | A_{\vec{m}}(0) \rangle = \langle B_{\vec{n}}(0) | A_{\vec{m}}(t' - t) \rangle \quad (2.20)$$

Drugim rečima, radi se o veličinama koje su invarijantne na vremenske translacije, što je posledica homogenosti vremena.

Pored toga, ako statistički operator napišemo u obliku:

$$\varrho_o = Q^{-1} \operatorname{Tr} \left\{ e^{-H/\theta} \right\} = Q^{-1} \operatorname{Tr} \left\{ e^{-\frac{i}{\hbar} H \frac{\hbar \theta}{i}} \right\}$$

vidimo da je:

$$\begin{aligned} \langle B_{\vec{n}}(t) A_{\vec{m}}(t') \rangle &= Q^{-1} \operatorname{Tr} \left\{ e^{-\frac{i}{\hbar} H \frac{\hbar \theta}{i}} e^{\frac{i}{\hbar} H t} B_{\vec{n}} e^{-\frac{i}{\hbar} H t} A_{\vec{m}}(t') \right\} = \\ &= Q^{-1} \operatorname{Tr} \left\{ e^{-H/\theta} A_{\vec{m}}(t') B_{\vec{n}}(t + i\hbar/\theta) \right\}. \end{aligned}$$

Prema tome, korelaciona funkcija ima i sledeće svojstvo:

$$\langle B_{\vec{n}}(t) A_{\vec{m}}(t') \rangle = \langle A_{\vec{m}}(t') B_{\vec{n}}(t + i\hbar/\theta) \rangle = \langle A_{\vec{m}}(t' - i\hbar/\theta) B_{\vec{n}}(t) \rangle \quad (2.21)$$

Zahvaljujući svojstvu (2.20) može se uvesti Furije ili spektralna reprezentacija korelacione funkcije,

$$\langle A_{\vec{m}}(t') B_{\vec{n}}(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega(t-t')} \langle A_{\vec{m}} B_{\vec{n}} \rangle_{\omega} \quad (2.22)$$

gde je $\langle A_{\vec{m}} B_{\vec{n}} \rangle_{\omega}$ - Furije lik ili tzv. spektralna gustina korelacione funkcije. Slično tome, koristeći svojstvo (2.21), nakon smene $t - t' \rightarrow t - t' + i/\theta$ u jednačini (2.22), dobijamo:

$$\langle B_{\vec{n}}(t) A_{\vec{m}}(t') \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' e^{-i\omega'(t-t')} e^{i\omega'/\theta} \langle A_{\vec{m}} B_{\vec{n}} \rangle_{\omega'} \quad (2.23)$$

Na isti način se može uvesti i spektralna reprezentacija Grinove funkcije.

$$G_{\vec{n},\vec{m}}(t - t') = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega(t-t')} G_{\vec{n},\vec{m}}(\omega). \quad (2.24)$$

Da bi povezali Furije lik Grinove funkcije,

$$G_{\vec{n},\vec{m}}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau e^{i\omega\tau} G_{\vec{n},\vec{m}}(\tau), \quad \tau = t - t' \quad (2.25)$$

sa spektralnom gustom korelacione funkcije (2.22), iskoristićemo $\Theta(\tau)$ - funkciju u obliku,

$$\Theta(\tau) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} e^{-\epsilon\tau} \Theta(\tau) \quad (2.26)$$

Uvrštavajući jednačinu (2.22) i (2.23) u (2.24) i koristeći (2.26) dobijamo:

$$\begin{aligned} G_{\vec{n},\vec{m}}(\omega) &= \frac{1}{2\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau e^{-\epsilon\tau+i\omega\tau} \Theta(\tau) \{ \langle B_{\vec{n}}(\tau) A_{\vec{m}}(0) \rangle \pm \langle A_{\vec{m}}(0) B_{\vec{n}}(\tau) \rangle \} = \\ &= \frac{1}{2\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \left(e^{i\omega'/\theta} \pm 1 \right) \langle A_{\vec{m}} B_{\vec{n}} \rangle_{\omega'} \int_0^{\infty} d\tau e^{i(\omega-\omega'+i\epsilon)\tau} = \\ &= \frac{1}{2\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{\left(e^{i\omega'/\theta} \pm 1 \right) \langle A_{\vec{m}} B_{\vec{n}} \rangle_{\omega'}}{\omega - \omega' + i\epsilon} \end{aligned} \quad (2.27)$$

Uvodeći spektralnu gustinu Grinovih funkcija,

$$g_{\vec{n},\vec{m}}(\omega) = \left(e^{\hbar\omega/\theta} \pm 1 \right) \langle A_{\vec{m}} B_{\vec{n}} \rangle_\omega \quad (2.28)$$

vidimo da jednačina (2.27) predstavlja Lemanovu spektralnu reprezentaciju Grinovih funkcija [15],

$$G_{\vec{n},\vec{m}}(\omega + i\epsilon) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{g_{\vec{n},\vec{m}}(\omega')}{\omega - \omega' + i\epsilon} \quad (2.29)$$

Koristeći simboličku relaciju:

$$\frac{1}{\omega - \omega' \pm i\epsilon} = \mathcal{P} \left\{ \frac{1}{\omega - \omega'} \right\} \mp i\pi \delta(\omega - \omega') \quad (2.30)$$

u kojoj \mathcal{P} označava glavnu vrednost odgovarajućeg integrala, spektralnu gustinu Grinove funkcije možemo izraziti u obliku:

$$g_{\vec{n},\vec{m}}(\omega) = 2 \operatorname{Re} G_{\vec{n},\vec{m}}(\omega + i\epsilon) = -2 \operatorname{Re} G_{\vec{n},\vec{m}}(\omega - i\epsilon) \quad (2.31)$$

Ovde se pretpostavlja da je spektralna gistica korelace funkcije $\langle A_{\vec{m}} B_{\vec{n}} \rangle_\omega$ - realna funkcija [26]. Na taj način, poznavanje Grinove funkcije, odnosno, njene spektralne gustine omogućava izračunavanje običnih (istovremenih) korelacionih funkcija,

$$\langle A_{\vec{m}}(t) B_{\vec{n}}(t) \rangle = \int d\omega \frac{g_{\vec{n},\vec{m}}(\omega)}{e^{\hbar\omega/\theta} \pm 1} \quad (2.32)$$

koje određuju ravnotežna svojstva čvrstih tela.

Pomoću simbolične relacije (2.30) za δ -funkciju, takođe vidimo da su realni i imaginarni deo Grinove funkcije povezani disperzionom relacijom Kramers-Kroniga [15]:

$$\operatorname{Im} G_{\vec{n},\vec{m}}(\omega) = \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \left\{ \int d\omega' \frac{\operatorname{Re} G_{\vec{n},\vec{m}}(\omega')}{\omega - \omega'} \right\} \quad (2.33)$$

Ona omogućava izračunavanje imaginarnog dela Grinove funkcije ako je poznat realni deo i obrnuto. Pored toga, integrirajući Furije lik Grinove funkcije (2.25) po svim frekvencijama, dobijamo sledeću relaciju:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega G_{\vec{n},\vec{m}}(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \Theta(t) \langle [B_{\vec{n}}(t), A_{\vec{m}}(0)]_{\pm} \rangle = \\ &= \int_0^{\infty} dt \delta(t) \langle [B_{\vec{n}}(t), A_{\vec{m}}(0)]_{\pm} \rangle = \\ &= \langle [B_{\vec{n}}(0), A_{\vec{m}}(0)]_{\pm} \rangle \end{aligned} \quad (2.34)$$

Integralne relacije ovog tipa predstavljaju pravila sume za Grinove funkcije [3].

2.1.3 Osobine Grinovih funkcija

Dvovremenske, retardovane i avansovane Grinove funkcije sadrže dovoljno informacija o svojstvima čvrstih tela tako da se kao osnovni problem postavlja pitanje metoda za njihovo izračunavanje. Danas su dobro poznata dva metoda: perturbacioni i metod jednačina kretanja, koji će se ovde koristiti. Dok se u prvom slučaju retardovane Grinove funkcije računaju posredno (pomoću Macubara Grinovih funkcija), u drugom slučaju one se računaju direktno, rešavanjem odgovarajućih jednačina kretanja. Pošto oblik ovih jednačina zavisi od konkretnog sistema, odnosno njegovog hamiltonijana, ovde ćemo samo ukazati na postupak za njihovo formiranje i rešavanje u slučaju kristalnih filmova.

Jednačina kretanja za Grinovu funkciju (2.13) se može dobiti njenim diferenciranjem po vremenu:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} G_{\vec{n},\vec{m}}(t-t') &= i\hbar \frac{d}{dt} \Theta(t-t') \langle [B_{\vec{n}}(t), A_{\vec{m}}(t')] \rangle + \\ &+ \Theta(t-t') \left\langle \left[\frac{dB_{\vec{n}}(t)}{dt}, A_{\vec{m}}(t') \right] \right\rangle \end{aligned} \quad (2.35)$$

Koristeći Hajzenbergove jednačine kretanja za operatore $B_{\vec{n}}(t)$,

$$i\hbar \frac{dB_{\vec{n}}(t)}{dt} = [B_{\vec{n}}(t), H]$$

i činjenicu da je,

$$\frac{d \Theta(t-t')}{dt} = -\frac{d \Theta(t-t')}{dt'} = \delta(t-t')$$

jednačina (2.35) postaje:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} G_{\vec{n},\vec{m}}(t-t') &= i\hbar \delta(t-t') \langle [B_{\vec{n}}(t), A_{\vec{m}}(t)] \rangle + \\ &+ \Theta(t-t') \langle [[B_{\vec{n}}(t), H], A_{\vec{m}}(t')] \rangle \end{aligned} \quad (2.36)$$

Prvi član na desnoj strani poslednje jednačine, $\langle [B_{\vec{n}}(t), A_{\vec{m}}(t)] \rangle$ predstavlja korelator Grinove funkcije i za njegovo izračunavanje dovoljno je znati komutacione relacije operatora $B_{\vec{n}}$ i $A_{\vec{m}}$. Za izračunavanje drugog člana u jednačini (2.36) potrebno je znati i eksplicitnu formu hamiltonijana. Međutim, i bez toga, jasno je da se u opštem slučaju radi o Grinovoj funkciji koja je višeg reda od polazne. Za nju se takođe može formirati jednačina kretanja tipa (2.36) u kojoj bi se pojavila Grinova funkcija još višeg reda, itd.[1]. Na taj način bi se dobio beskonačan lanac kuplovanih jednačina za Grinove funkcije. Izuzetak su jedino kvadratni hamiltonijani kada se u jednačini kretanja (2.36) ne pojavljuju više Grinove funkcije [13]. Da bi se dobijeni lanac jednačina iskoristio za nalaženje potrebne (polazne) Grinove funkcije nužno je pre svega izvršiti njegovo „dekupovanje” tj. njegovo redukovanje na konačan sistem jednačina. To se postiže tako što se podesnom aproksimacijom na nekom mestu u lancu jednačina, viša Grinova funkcija izrazi preko prve niže Grinove funkcije. Kod tako dobijenog sistema jednačina mogu se izvršiti vremenske Furije transformacije Grinovih funkcija,

$$G_{\vec{n}, \vec{m}}(t - t') = \int d\omega e^{-i\omega t} G_{\vec{n}, \vec{m}}(\omega),$$

$$\ll [B_{\vec{n}}(t), H] | A_{\vec{m}}(t') \gg = \int d\omega e^{-i\omega t} \ll [B_{\vec{n}}, H] | A_{\vec{m}} \gg_{\omega}.$$

Tako se dobija jednačina kretanja za Furije komponente Grinovih funkcija,

$$\hbar \omega G_{\vec{n}, \vec{m}}(\omega) = \frac{i\hbar}{2\pi} \langle [B_{\vec{n}}, A_{\vec{m}}] \rangle + \ll [B_{\vec{n}}, H] | A_{\vec{m}} \gg_{\omega}. \quad (2.37)$$

Napomenimo da se integracijom ove jednačine po svim frekvencijama dobija novo pravilo sume za Grinove funkcije:

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \left\{ \hbar \omega G_{\vec{n}, \vec{m}}(\omega) - \frac{i\hbar}{2\pi} \langle [B_{\vec{n}}, A_{\vec{m}}] \rangle \right\} = \\ & = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \ll [B_{\vec{n}}, H] | A_{\vec{m}} \gg_{\omega} = \langle [[B_{\vec{n}}, H], A_{\vec{m}}] \rangle \end{aligned}$$

Slična pravila suma se mogu dobiti i za više Grinove funkcije razmatranjem odgovarajućih jednačina kretanja. Dalja transformacija jednačine (2.37) je moguća kod masivnih kristala koji su translaciono invarijantni. U tom slučaju, Grinova funkcija ne zavisi od položaja čvorova kristalne rešetke, već jedino od njihove međusobne udaljenosti. To znači da se mogu uvesti potpune prostorne Furije - transformacije Grinove funkcije,

$$G_{\vec{n}, \vec{m}}(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})} G(\vec{k}, \omega); \quad N = N_x N_y N_z$$

Nakon ovih transformacija jednačina (2.37), u slučaju kvadratnih hamiltonijana, postaje obična algebarska jednačina iz koje se može odrediti Furije lik $G(\vec{k}; \omega)$.

Za razliku od masivnih kristala, kod kristalnih filmova, translaciona simetrija je narušena duž (z) pravca normalnog na slojeve filma tako da su moguće samo parcijalne prostorne Furije transformacije,

$$G_{\vec{n}, \vec{m}}(\omega) = \frac{1}{N_x N_y} \sum_{\vec{k}_{||}} e^{i\vec{k}_{||}(\vec{n}_{||} - \vec{m}_{||})} G_{n_z, m_z}(\vec{k}_{||}; \omega) \quad (2.38)$$

gde su: $\vec{k}_{||} = k_x \vec{i} + k_y \vec{j}$; $\vec{n}_{||} = n_x \vec{i} + n_y \vec{j}$; $\vec{m}_{||} = m_x \vec{i} + m_y \vec{j}$.

Pošto je translaciona invarijantnost sačuvana u različitim slojevima filma, Grinova funkcija će zadržati indeks sloja. To će imati za posledicu da jednačina kretanja za Grinovu funkciju prelazi u sistem diferencnih jednačina. Rešavanje ovakvog sistema ćemo detaljno razmatrati za fononsku i elektronsku Grinovu funkciju u narednim poglavljima.

2.2 Ravnotežna svojstva idealnih kristala

2.2.1 Harmonijsko oscilovanje kristalne rešetke

Metodom Grinovih funkcija najpre ćemo ukratko analizirati dinamička svojstva kristalne rešetke masivnih kristala bez primesa i granica. Radi jednostavnosti, pretpostavljamo da se radi o prostoj kubnoj strukturi sa jednim atomom po elementarnoj celiji. Složenije kristalne strukture se takođe mogu analizirati ovim metodom.

Fononski hamiltonijan u harmonijskoj aproksimaciji i aproksimaciji najbližih suseda ima poznati oblik [3, 10],

$$\begin{aligned} H = & \frac{M}{2} \sum_{\alpha, \vec{n}} v_{\alpha, \vec{n}}^2 + \frac{1}{4} \sum_{\alpha; n_x, n_y, n_z} C_{\alpha\alpha} \left[\left(u_{\alpha; n_x+1, n_y, n_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z} \right)^2 + \right. \\ & + \left(u_{\alpha; n_x-1, n_y, n_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z} \right)^2 + \left(u_{\alpha; n_x, n_y+1, n_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z} \right)^2 + \\ & + \left(u_{\alpha; n_x, n_y-1, n_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z} \right)^2 + \\ & \left. + \left(u_{\alpha; n_x, n_y, n_z+1} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z} \right)^2 + \left(u_{\alpha; n_x, n_y, n_z-1} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z} \right)^2 \right] \end{aligned} \quad (2.39)$$

gde je $\alpha \equiv (x, y, z)$, a $u_{\alpha, \vec{n}}$ i $v_{\alpha, \vec{n}}$ - komponente pomeraja i brzine atoma mase M na čvoru $\vec{n} \equiv (n_x, n_y, n_z)$. Torzionalne konstante $C_{\alpha\beta}$ su zanemarene u odnosu na konstante istezanja $C_{\alpha\alpha}$. Operatori $u_{\alpha, \vec{n}}$ i $p_{\alpha, \vec{n}} = Mv_{\alpha, \vec{n}}$, zadovoljavaju standardne komutacione relacije

$$[u_{\alpha, \vec{n}}, p_{\beta, \vec{m}}] = i\hbar \delta_{\vec{n}, \vec{m}} \delta_{\alpha\beta}, \quad [u_{\alpha, \vec{n}}, u_{\beta, \vec{m}}] = [p_{\alpha, \vec{n}}, p_{\beta, \vec{m}}] = 0 \quad (2.40)$$

Ravnotežna svojstva kristalne rešetke, opisane hamiltonijanom (2.39), potpuno su određena dvovremenskim komutatorskim Grinovim funkcijama fononskih pomeraja:

$$G_{\vec{n}, \vec{m}}^{\alpha\alpha}(t) \equiv \langle \langle u_{\alpha, \vec{n}}(t) | u_{\alpha, \vec{m}}(0) \rangle \rangle = \Theta(t) \langle [u_{\alpha, \vec{n}}(t), u_{\alpha, \vec{m}}(0)] \rangle \quad (2.41)$$

Zbog toga je najpre potrebno izračunati same Grinove funkcije, što zahteva formiranje odgovarajućih jednačina kretanja. Diferenciranjem izraza (2.41) po vremenu, uzimajući u obzir komutacione relacije (2.40), dobija se jednačina oblika:

$$i\hbar \frac{d}{dt} G_{\vec{n}, \vec{m}}^{\alpha\alpha}(t) = \frac{i\hbar}{M} \langle \langle p_{\alpha, \vec{n}}(t) | u_{\alpha, \vec{m}}(0) \rangle \rangle \quad (2.42)$$

Nakon vremenskih Furije transformacija:

$$\begin{aligned} G_{\vec{n}, \vec{m}}^{\alpha\alpha}(t) &= \int d\omega e^{-i\omega t} G_{\vec{n}, \vec{m}}^{\alpha\alpha}(\omega) \\ \langle \langle p_{\alpha, \vec{n}}(t) | u_{\alpha, \vec{m}}(0) \rangle \rangle &= \int d\omega e^{-i\omega t} \langle \langle p_{\alpha, \vec{n}} | u_{\alpha, \vec{m}} \rangle \rangle_\omega \end{aligned} \quad (2.43)$$

jednačina (2.42) postaje:

$$\omega G_{\vec{n}, \vec{m}}^{\alpha\alpha}(\omega) = \frac{i}{M} \langle \langle p_{\alpha, \vec{n}} | u_{\alpha, \vec{m}} \rangle \rangle_\omega \quad (2.44)$$

Pomoću jednačine (2.44) može se pokazati da Furije lik Grinove funkcije zadovoljava integralnu relaciju - pravilo sume:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \omega G_{\vec{n},\vec{m}}^{\alpha\alpha}(\omega) = \frac{\hbar}{2M} \delta_{\vec{n},\vec{m}} \quad (2.45)$$

koja omogućava da se definiše lokalna spektralna gustina fononskih stanja,

$$d_{\vec{n}}^{\alpha}(\omega) = \frac{2M}{\hbar} \operatorname{Re} G_{\vec{n},\vec{n}}^{\alpha\alpha}(\omega + i0^+) \quad (2.46)$$

Veličina $d_{\vec{n}}^{\alpha}(\omega) d\omega$ - određuje broj fononskih stanja na čvoru \vec{n} čije frekvencije leže u intervalu $(\omega, \omega + d\omega)$. Iz pravila sume (2.45) neposredno sledi da je gustina stanja normirana,

$$\int_0^{\omega_{max}} d\omega d_{\vec{n}}^{\alpha}(\omega) = 1 \quad (2.47)$$

gde je ω_{max} - maksimalna frekvencija fononskog spektra.

Jednačinu kretanja za Grinovu funkciju možemo dobiti diferenciranjem izraza (2.41) dva puta po vremenu:

$$-M \frac{d^2}{dt^2} G_{\vec{n},\vec{m}}^{\alpha\alpha}(t) = i\hbar \delta_{\vec{n},\vec{m}} \delta(t) - \frac{\Theta(t)}{i\hbar} \langle [[p_{\alpha;\vec{n}}(t), H(t)] , u_{\alpha;\vec{m}}(0)] \rangle \quad (2.48)$$

Nakon izračunavanja potrebnih komutatora ona poprima oblik:

$$\begin{aligned} -M \frac{d^2}{dt^2} G_{\vec{n},\vec{m}}^{\alpha\alpha}(t) &= i\hbar \delta_{\vec{n},\vec{m}} \delta(t) + C_{\alpha\alpha} (6 G_{\vec{n},\vec{m}}^{\alpha\alpha} - \\ &- G_{n_x+1,n_y,n_z;m_x,m_y,m_z}^{\alpha\alpha} - G_{n_x-1,n_y,n_z;m_x,m_y,m_z}^{\alpha\alpha} - \\ &- G_{n_x,n_y+1,n_z;m_x,m_y,m_z}^{\alpha\alpha} - G_{n_x,n_y-1,n_z;m_x,m_y,m_z}^{\alpha\alpha} - \\ &- G_{n_x,n_y,n_z+1;m_x,m_y,m_z}^{\alpha\alpha} - G_{n_x,n_y,n_z-1;m_x,m_y,m_z}^{\alpha\alpha}) \end{aligned} \quad (2.49)$$

Zahvaljujući translacionoj invarijantnosti beskonačnog idealnog kristala, mogu se izvršiti ne samo vremenske, nego i potpune trodimenzijsne prostorne Furije transformacije Grinovih funkcija

$$G_{\vec{n},\vec{m}}^{\alpha\alpha}(t) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} e^{i(\vec{n}-\vec{m})\vec{k}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} G_{\vec{k}}^{\alpha\alpha}(\omega) \quad (2.50)$$

Primenom ovih transformacija, sistem diferencijalno-diferencnih jednačina (2.49), prelazi u sistem algebarskih jednačina jedinstvene forme:

$$\left\{ \omega^2 - 2 \frac{C_{\alpha\alpha}}{M} [\cos(a_x k_x) + \cos(a_y k_y) + \cos(a_z k_z)] - 3 \right\} G_{\vec{k}}^{\alpha\alpha}(\omega) = \frac{i\hbar}{2\pi M} \quad (2.51)$$

čija su rešenja očigledno,

$$G_{\vec{k}}^{\alpha\alpha}(\omega) = \frac{i\hbar}{4\pi M \omega_k^{\alpha}} \left(\frac{1}{\omega - \omega_k^{\alpha}} - \frac{1}{\omega + \omega_k^{\alpha}} \right) \quad (2.52)$$

gde je

$$\omega_{\vec{k}}^{\alpha} = 2 \Omega_{\alpha} \sqrt{\sin^2 \frac{a_x k_x}{2} + \sin^2 \frac{a_y k_y}{2} + \sin^2 \frac{a_z k_z}{2}} ; \quad \Omega_{\alpha} = \sqrt{C_{\alpha\alpha}/M}. \quad (2.53)$$

Poslednja relacija predstavlja poznati zakon disperzije za akustičke fonone [8].

Koristeći simboličku Dirakovu relaciju:

$$\frac{1}{x \pm \epsilon} = \mathcal{P} \left\{ \frac{1}{x} \right\} \mp i\pi \delta(x), \quad \epsilon \rightarrow 0^{+}$$

neposredno se dobija spektralna gustina Grinove funkcije

$$g_{\vec{k}}^{\alpha}(\omega) = 2 \operatorname{Re} G_{\vec{k}}^{\alpha\alpha}(\omega + i\epsilon) |_{\epsilon \rightarrow 0^{+}} = \frac{\hbar}{2M \omega_{\vec{k}}^{\alpha}} [\delta(\omega - \omega_{\vec{k}}^{\alpha}) - \delta(\omega + \omega_{\vec{k}}^{\alpha})] \quad (2.54)$$

Pomoću spektralne gustine $g_{\vec{k}}^{\alpha}(\omega)$ i zakona disperzije (2.53) može se sada odrediti gustina fononskih stanja,

$$d^{\alpha}(\omega) = \frac{2M}{\hbar} \operatorname{Re} \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} G_{\vec{k}}^{\alpha\alpha}(\omega + i\epsilon) |_{\epsilon \rightarrow 0^{+}} \equiv \frac{M}{\hbar} \sum_{\vec{k}} g_{\vec{k}}^{\alpha}(\omega) \quad (2.55)$$

koja, u slučaju translaciono invarijantnih kristala, očigledno ne zavisi od indeksa čvora (\vec{n}), tj. ima „globalni“ karakter. Uvrštavajući relaciju (2.54) u (2.55) i koristeći zakon disperzije (2.53) u dugotalasnoj aproksimaciji ($ka << 1$),

$$\omega_{\vec{k}} \simeq \Omega a \quad k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2} \quad \Omega_0 = \sqrt{C/M} \quad (2.56)$$

za prostu kubnu strukturu ($a_x = a_y = a_z = a$) dobijamo poznat izraz [3]:

$$d(\omega) = \frac{V}{2\pi^2 \Omega_0^3 a^3} \omega^2 \quad (2.57)$$

Gustina fononskih stanja omogućava izračunavanje svih aditivnih termodinamičkih karakteristika kristalne rešetke. Ovde ćemo odrediti temperatursku zavisnost srednjeg kvadrata fononskih pomeraja, srednjeg kvadrata brzina atoma, kao i unutrašnje energije, odnosno specifične topote. U tom cilju je najpre potrebno odrediti maksimalnu – Debajevu frekvenciju fononskog spektra ω_D . Ona se dobija iz uslova [14] da je broj čvorova kristalne rešetke jednak broju fononskih stanja,

$$N = \int_0^{\omega_D} d(\omega) d\omega. \quad (2.58)$$

Koristeći izraz (2.57), nakon elementarne integracije u (2.58) dobijamo,

$$\omega_D = \Omega_0 \sqrt[3]{6\pi^2} \quad (2.59)$$

Srednji kvadrat pomeraja na bilo kom čvoru \vec{n} možemo izračunati polazeći od Furije transformacije oblika (2.50) za jednovremenske korelace funkcije,

$$\langle u_{\alpha;\vec{n}}^2(t) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \langle u_{\alpha;\vec{k}}^2 \rangle_{\omega} \quad (2.60)$$

Furije lik $\langle u_{\alpha;\vec{k}}^2 \rangle_{\omega}$ korelace funkcije, određen je spektralnom gustinom Grinove funkcije,

$$\langle u_{\alpha;\vec{k}}^2 \rangle_{\omega} = \frac{g_k^{\alpha}(\omega)}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}; \quad \beta \equiv 1/\theta \quad (2.61)$$

Koristeći relaciju (2.54), nakon zamene izraza (2.61) u (2.60), dobijamo:

$$\langle u_{\alpha;\vec{n}}^2(t) \rangle = \frac{\hbar}{2MN} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\omega_k^{\alpha}} \coth\left(\frac{\beta\hbar}{2} \omega_k^{\alpha}\right) \quad (2.62)$$

Standardnim prelaskom sa sume po \vec{k} na integral po ω pomoću gustine stanja (2.57),

$$\sum_{\vec{k}} \dots = \int d\omega d(\omega) \dots \quad (2.63)$$

u izrazu (2.62) dobijamo integrale koji se mogu analitički odrediti u dugotalasnoj aproksimaciji kada zakon disperzije (2.56) ima linearnu formu. U tom slučaju, jednačina (2.60) postaje:

$$\langle u_{\alpha;\vec{n}}^2(t) \rangle = \frac{\hbar}{4\pi^2 M \Omega_{\alpha}^3} \int_0^{\omega_D} d\omega \omega \coth\left(\frac{\beta\hbar}{2} \omega\right) \quad (2.64)$$

Smenom $x = \beta\hbar\omega/2$ dobijamo:

$$\langle u_{\alpha;\vec{n}}^2(t) \rangle = \frac{\theta^2}{\pi^2 C \hbar \Omega_{\alpha}} \int_0^{x_{max}} dx x \coth(x) \quad (2.65)$$

gde je $x_{max} = \beta\hbar\omega_D/2$. Poslednji integral se može izračunati razvijanjem funkcije $\coth(x)$ u red:

$$\coth(x) = 1 + 2 \sum_{j=1}^{\infty} e^{-2jx}$$

Višestruka parcijalna integracija u (2.65) dovodi do pojave kako Rimanove ζ -funkcije:

$$\zeta(s) = \sum_{j=1}^{\infty} j^{-s}; \quad s \geq 1, \quad \{\zeta(2) = \pi^2/6, \quad \zeta(4) = \pi^4/90\}$$

tako i Dajsonovih \mathcal{Z} -funkcija:

$$\mathcal{Z}_r(s) = \sum_{j=1}^{\infty} j^{-r} e^{-js}, \quad r \geq 1$$



Na taj način, uvodeći bezdimenzionu „temperaturu” $t = \theta/\theta_0$, ($\theta_0 = \hbar\Omega_0$), za srednje kvadrate pomeraja u jedinicama $[\theta_0/C]$, konačno dobijamo,

$$\langle u_{\alpha;\vec{n}}^2 \rangle = \frac{1}{2\pi^2} \left[\frac{D_b^2}{4} + \frac{\pi^2}{6} t^2 - D_b t \mathcal{Z}_1(D_b/t) - t^2 \mathcal{Z}_2(D_b/t) \right] \quad (2.66)$$

gde je $D_b = (6\pi^2)^{1/3}$ - bezdimenzionala Debajeva frekvencija masivnog kristala. Iz jednačine (2.66) vidimo da je na apsolutnoj nuli ($t = 0$),

$$\langle u_{\alpha;\vec{n}}^2 \rangle_0 = [\theta_0/C] \frac{D_b^2}{8\pi^2} \quad (2.67)$$

što odgovara nultim oscilacijama u čvrstom telu. Amplituda nultih oscilacija (2.67) se može napisati u obliku [27]:

$$\langle u_{\alpha;\vec{n}}^2 \rangle_0 = \frac{3 \hbar^2}{4 M k_B T_D}$$

gde je $T_D = \hbar\Omega_0 D_b / k_B$ - Debajeva temperatura. Na visokim temperaturama, $k_B T \gg \theta_0$, veličina $\langle u^2 \rangle$ je proporcionalna apsolutnoj temperaturi,

$$\langle u_{\alpha;\vec{n}}^2 \rangle = A T; \quad A = \frac{D_b k_B}{2\pi^2 C}$$

pri čemu se koeficijent proporcionalnosti A može izraziti pomoću Debajeve temperature

$$A = \frac{3 \hbar^2}{M k_B T_D^2}$$

Srednji kvadrati brzina atoma u „balku”, računaju se polazeći od relacije:

$$\langle v_{\alpha;\vec{n}}^2(t) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \omega^2 \langle u_{\alpha;\vec{k}}^2 \rangle_{\omega} \quad (2.68)$$

koja se može napisati u obliku:

$$\langle v_{\alpha;\vec{n}}^2 \rangle = \frac{\hbar}{2MN} \sum_{\vec{k}} \omega_{\vec{k}}^{\alpha} \coth \left(\frac{\beta\hbar}{2} \omega_{\vec{k}}^{\alpha} \right) \quad (2.69)$$

Nakon prelaska sa sume na integral u poslednjoj jednačini se pojavljuje novi integral:

$$\langle v_{\alpha;\vec{n}}^2(t) \rangle = \frac{4\theta_0 t^4}{\pi^2 M} \int_0^{x_{max}} dx x^3 \coth(x) \quad (2.70)$$

Izračunavanjem ovog integrala kao u (2.65), za srednje kvadrate brzina atoma u jedinicama $[\theta_0/M]$ dobijamo:

$$\begin{aligned} \langle v_{\alpha;\vec{n}}^2(t) \rangle &= \frac{1}{2\pi^2} \left\{ \frac{D_b^4}{8} + \frac{\pi^4}{15} t^4 - \right. \\ &- \left. \left[D_b^3 t \mathcal{Z}_1(D_b/t) + 3D_b^2 t^2 \mathcal{Z}_2(D_b/t) + 6D_b t^3 \mathcal{Z}_3(D_b/t) + 6t^4 \mathcal{Z}_4(D_b/t) \right] \right\} \end{aligned} \quad (2.71)$$

Iz jednačine (2.71) neposredno se dobija vrednost srednjeg kvadrata brzine nultih oscilacija:

$$\langle v_{\alpha;\vec{n}}^2 \rangle_0 = \left[\frac{\theta_0}{M} \right] \frac{D_b^4}{16\pi^2} = \frac{3k_B^3 T_D^3}{8\hbar^2 C} \quad (2.72)$$

i njegovo ponašanje na visokim temperaturama,

$$\langle v_{\alpha;\vec{n}}^2 \rangle = \frac{3k_B}{M} T.$$

Pošto smo odredili temperatursku zavisnost srednjih kvadrata pomeraja i brzina, sada možemo preći na izračunavanje unutrašnje energije i specifične toplote kristalne rešetke. Polazeći od kvantno-statističke definicije unutrašnje energije:

$$U = \langle H \rangle = \langle T \rangle + \langle V \rangle \quad (2.73)$$

i hamiltonijana (2.39), za srednju vrednost kinetičke energije odmah možemo pisati:

$$\langle T \rangle = \frac{3}{2} M \sum_{\vec{k}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \langle u_{\vec{k}}^2 \rangle_{\omega} \omega^2 \quad (2.74)$$

gde je $\langle u_{\vec{k}}^2 \rangle_{\omega} \equiv \langle u_{x;\vec{k}}^2 \rangle_{\omega} = \langle u_{y;\vec{k}}^2 \rangle_{\omega} = \langle u_{z;\vec{k}}^2 \rangle_{\omega}$ - za prostu kubnu rešetku.

Kod izračunavanja srednje vrednosti potencijalne energije, pojavljuju se korelacione funkcije tipa:

$$\mathcal{K}_{\alpha;n_x \pm 1, n_y, n_z} \equiv \langle (u_{\alpha;n_x+1, n_y, n_z} - u_{\alpha;n_x, n_y, n_z})^2 \rangle + \langle (u_{\alpha;n_x-1, n_y, n_z} - u_{\alpha;n_x, n_y, n_z})^2 \rangle \quad (2.75)$$

Zahvaljujući svojstvu translacione invarijantnosti idealnog kristala, duž sva tri prostorna pravca ($\alpha = x, y, z$) važe jednakosti,

$$\langle u_{\alpha;n_x+1, n_y, n_z}^2 \rangle = \langle u_{\alpha;n_x, n_y, n_z}^2 \rangle = \langle u_{\alpha;n_x-1, n_y, n_z}^2 \rangle \quad (2.76)$$

tako da se korelaciona funkcija (2.75) svodi na oblik,

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_{\alpha;n_x \pm 1, n_y, n_z} &= 4 \langle u_{\alpha;n_x, n_y, n_z}^2 \rangle - \\ &- 2 \left(\langle u_{\alpha;n_x+1, n_y, n_z} u_{\alpha;n_x, n_y, n_z} \rangle + \langle u_{\alpha;n_x-1, n_y, n_z} u_{\alpha;n_x, n_y, n_z} \rangle \right) \end{aligned} \quad (2.77)$$

Nakon Furije transformacija tipa (2.60) korelacionih funkcija (2.77) i neznatnog sređivanja, dobijamo:

$$\mathcal{K}_{\alpha;\vec{k}} = \frac{8}{N} \sum_{\vec{k}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \langle u_{\alpha;\vec{k}}^2 \rangle_{\omega} \sin^2 \frac{k_x a}{2} \quad (2.78)$$

Slične izraze bismo dobili i za preostala dva tipa korelacionih funkcija: $\mathcal{K}_{\alpha;n_x, n_y \pm 1, n_z}$ i $\mathcal{K}_{\alpha;n_x, n_y, n_z \pm 1}$, tako da se sumiranjem po svim pravcima ($\alpha = x, y, z$) i svim čvorovima (n_x, n_y, n_z) dobija srednja vrednost potencijalne energije u obliku:

$$\langle V \rangle = 6 C \sum_{\vec{k}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \langle u_{\vec{k}}^2 \rangle_{\omega} \left(\sin^2 \frac{k_x a}{2} + \sin^2 \frac{k_y a}{2} + \sin^2 \frac{k_z a}{2} \right) \quad (2.79)$$

Pomoću zakona disperzije (2.53) vidimo da je $\langle V \rangle = \langle T \rangle$ tako da je unutrašnja energija kristalne rešetke:

$$U = 3M \sum_{\vec{k}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \langle u_{\vec{k}}^2 \rangle_{\omega} \omega^2 \quad (2.80)$$

Koristeći i ovde relacije (2.54) i (2.61) dobijamo dobro poznatu formulu [14]:

$$U = \frac{3}{2} \sum_{\vec{k}} \hbar \omega_{\vec{k}} \coth \left(\frac{\beta \hbar}{2} \omega_{\vec{k}} \right) \quad (2.81)$$

u nešto izmenjenom obliku. Nakon prelaska sa sume na integral, ovde će se pojaviti integral koji smo već sreli kod proračuna srednjeg kvadrata brzine atoma. Na taj način, za unutrašnju energiju po čvoru kristalne rešetke u jedinicama $[\theta_0]$ konačno dobijamo:

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} U &= \frac{3}{2\pi^2} \left\{ \frac{D_b^4}{8} + \frac{\pi^4}{15} t^4 - \right. \\ &\quad \left. - \left[D_b^3 t \mathcal{Z}_1(D_b/t) + 3 D_b^2 t^2 \mathcal{Z}_2(D_b/t) + 6 D_b t^3 \mathcal{Z}_3(D_b/t) + 6 t^4 \mathcal{Z}_4(D_b/t) \right] \right\} \end{aligned} \quad (2.82)$$

Iz ovog izraza vidimo da nultim oscilacijama elementarne celije odgovara unutrašnja energija:

$$\frac{1}{N} U_0 = \frac{3D_b^4}{16\pi^2} \quad (2.83)$$

Pomoću izraza (2.82) koji određuje temperatursku zavisnost unutrašnje energije, sada ćemo izračunati specifičnu toplotu polazeći od definicije:

$$C_V = \frac{k_B}{N} \frac{\partial U}{\partial \theta} = \frac{k_B}{N\theta_0} \frac{\partial U}{\partial t} \quad (2.84)$$

Koristeći relacije za izvode Dajsonovih \mathcal{Z} -funkcija:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{Z}_1(D/t) &= \frac{D}{t^2} (e^{D/t} - 1)^{-1} \\ \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{Z}_r(D/t) &= \frac{D}{t^2} \mathcal{Z}_{r-1}(D/t) \quad r \geq 2 \end{aligned} \quad (2.85)$$

za specifičnu toplotu po čvoru kristalne rešetke u jedinicama $[k_B]$ dobijamo:

$$\begin{aligned} C_V &= \frac{1}{N} \frac{3}{2\pi^2} \left\{ \frac{4\pi^4}{15} t^3 - \frac{D_b^4}{t} (e^{D_b/t} - 1)^{-1} - \right. \\ &\quad \left. - \left[4D_b^3 \mathcal{Z}_1(D_b/t) + 12 D_b^2 t \mathcal{Z}_2(D_b/t) + 24 D_b t^2 \mathcal{Z}_3(D_b/t) + 24 t^3 \mathcal{Z}_4(D_b/t) \right] \right\} \end{aligned} \quad (2.86)$$

Na niskim temperaturama dominantan je prvi sabirak unutar vitičaste zagrade u jednačini (2.86), što daje poznati T^3 zakon [14]:

$$C_V = \frac{2\pi^2}{5} t^3 \quad (2.87)$$

Na visokim temperaturama dolaze do izražaja preostali članovi u (2.86) tako da se dobija klasičan, Dilon-Ptiov zakon ($C_V = 3 [k_B]$).

2.2.2 Elektroni u beskonačnom kristalu

Sada ćemo razmotriti ravnotežna svojstva elektronskog podsistema idealnog beskonačnog kristala na bazi modela skoro slobodnih elektrona [16]. Zbog kasnijih generalizacija na kristalne filmove, ovde polazimo od elektronskog hamiltonijana u konfiguracionom prostoru [5]:

$$H = \sum_{\vec{n}} V_{\vec{n}} a_{\vec{n}}^+ a_{\vec{n}} - \sum_{\vec{n}, \vec{m}} W_{\vec{n}, \vec{m}} a_{\vec{n}}^+ a_{\vec{m}} \quad (2.88)$$

gde su $a_{\vec{n}}^+$ i $a_{\vec{n}}$ - kreacioni i anihilacioni operatori elektrona na čvoru \vec{n} rešetke. Veličina $V_{\vec{n}}$ 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, može se pokazati [13] da je hamiltonian (2.88) ekvivalentan hamiltonijanu elektronskog gasa u aproksimaciji efektivne mase,

$$H = \sum_{\vec{k}} E_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}} , \quad E_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2 m^*} \quad (2.89)$$

pri čemu je,

$$V = \frac{1}{N_x N_y N_z} \sum_{\vec{k}} E_{\vec{k}} e^{i \vec{k} \vec{n}}, \quad W_{\vec{n}, \vec{m}} = -\frac{1}{N_x N_y N_z} \sum_{\vec{k}} E_{\vec{k}} e^{i \vec{k} (\vec{n} - \vec{m})}$$

Iz translacione invarijantnosti idealnog kristala sledi periodičnost hamiltonijana (2.88) što ima za posledicu da je:

$$V_{\vec{n}} = V ; \quad W_{\vec{n}, \vec{m}} = W_{\vec{m}, \vec{n}} \equiv W , \quad \forall (\vec{n}, \vec{m}) \quad (2.90)$$

Na osnovu toga, u aproksimaciji najbližih suseda, elektronski hamiltonijan za prostu kubnu strukturu postaje,

$$\begin{aligned} H = & V \sum_{n_x, n_y, n_z} a_{n_x, n_y, n_z}^+ a_{n_x, n_y, n_z} - W \sum_{n_x, n_y, n_z} a_{n_x, n_y, n_z}^+ (a_{n_x+1, n_y, n_z} + a_{n_x-1, n_y, n_z} + \\ & + a_{n_x, n_y+1, n_z} + a_{n_x, n_y-1, n_z} + a_{n_x, n_y, n_z+1} + a_{n_x, n_y, n_z-1}) \end{aligned} \quad (2.91)$$

Svojstva posmatranog elektronskog sistema analiziraćemo pomoću antikomutatorske Grinove funkcije,

$$G_{\vec{n}, \vec{m}}(t) = \Theta(t) \langle [a_{\vec{n}}(t), a_{\vec{m}}^+(0)]_+ \rangle \quad (2.92)$$

koja zadovoljava jednačinu kretanja,

$$i\hbar \frac{d}{dt} G_{\vec{n}, \vec{m}}(t) = i\hbar \delta_{\vec{n}, \vec{m}} \delta(t) + \Theta(t) \langle [a_{\vec{n}}, H]_-, a_{\vec{m}}^+ \rangle_+ \quad (2.93)$$

Nakon izračunavanja komutatora $[a_{\vec{n}}, H]_-$ uz korišćenje standardnih fermionskih komutacionih relacija:

$$[a_{\vec{n}}, a_{\vec{m}}^+]_+ = \delta_{\vec{n}\vec{m}}, \quad [a_{\vec{n}}, a_{\vec{m}}]_+ = [a_{\vec{n}}^+, a_{\vec{m}}^+]_+ = 0$$

jednačina (2.93) prelazi u:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} G_{\vec{n},\vec{m}}(t) &= i\hbar \delta_{\vec{n}\vec{m}} \delta(t) + \Delta G_{\vec{n},\vec{m}}(t) - \\ &- [G_{n_x+1,n_y,n_z;\vec{m}}(t) + G_{n_x-1,n_y,n_z;\vec{m}}(t) + G_{n_x,n_y+1,n_z;\vec{m}}(t) + \\ &+ G_{n_x,n_y-1,n_z;\vec{m}}(t) + G_{n_x,n_y,n_z+1;\vec{m}}(t) + G_{n_x,n_y,n_z-1;\vec{m}}(t)] \end{aligned} \quad (2.94)$$

Pošto se radi o idealnoj kristalnoj strukturi, moguće je izvršiti potpuni Furije transform Grinove funkcije:

$$G_{\vec{n},\vec{m}}(t) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega G_{\vec{k}}(\omega) e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})-i\omega t} \quad (2.95)$$

čijom primenom jednačina (2.94) postaje:

$$\hbar\omega G_{\vec{k}}(\omega) = \frac{i\hbar}{2\pi} + \Delta G_{\vec{k}}(\omega) - 2W (\cos a_x k_x + \cos a_y k_y + \cos a_z k_z) \quad (2.96)$$

Njeno rešenje možemo napisati u obliku:

$$G_{\vec{k}}(E) = \frac{i\hbar}{2\pi} \frac{1}{E - E_{\vec{k}}}, \quad E = \hbar\omega \quad (2.97)$$

gde je

$$E_{\vec{k}} = V - 2W (\cos a_x k_x + \cos a_y k_y + \cos a_z k_z) \quad (2.98)$$

elektronski zakon disperzije [5]. Za degenerisani elektronski gas ($V = 6W$), zakon disperzije ima oblik:

$$E_{\vec{k}} = 4W \left(\sin^2 \frac{a_x k_x}{2} + \sin^2 \frac{a_y k_y}{2} + \sin^2 \frac{a_z k_z}{2} \right) \quad (2.99)$$

U tom slučaju, u dugotalasnoj aproksimaciji, efektivna masa elektrona iznosi:

$$m^* = \hbar^2 \left(\frac{d^2 E_{\vec{k}}}{dk^2} \right)^{-1} = \frac{\hbar^2}{2a^2 W}$$

Napomenimo ovde da se kod analize elektronskih spektara tankih filmova (Glava 4) balkovski zakon disperzije (2.99) koristi u obliku,

$$E_{\vec{k}} = 8WY(k_x, k_y) + 4W \sin^2 \frac{a_z k_z}{2}$$

gde je $Y(k_x, k_y) = \frac{1}{2} \left(\sin^2 \frac{a_x k_x}{2} + \sin^2 \frac{a_y k_y}{2} \right) \in (0, 1)$.

Pomoću Grinove funkcije (2.97) najpre ćemo odrediti gustinu elektronskih stanja:

$$d(E) = \sum_{\vec{k}} g_{\vec{k}}(E) \quad (2.100)$$

gde je spektralna gistica Grinove funkcije,

$$g_{\vec{k}}(E) = \frac{2}{\hbar} \operatorname{Re} G_{\vec{k}}(E + i 0^+) = \delta(E - E_{\vec{k}}) \quad (2.101)$$

Standardnim prelaskom sa sume na integral u (2.100), u dugotalasnoj aproksimaciji kada je $E = W a^2 k^2$, dobija se:

$$d(E) = \frac{V}{4\pi^2 a^3 W^{3/2}} \sqrt{E} = \frac{V (m^*)^{3/2}}{\sqrt{2} \pi^2 \hbar^3} \sqrt{E} \quad (2.102)$$

Koristeći spektralnu gesticu Grinove funkcije (2.101) možemo odrediti i broj zaposednuća elektronskih stanja,

$$n_{\vec{k}} = \int dE \frac{g_{\vec{k}}(E)}{e^{\beta(E-\mu)} + 1} = \left[e^{\beta(E_{\vec{k}}-\mu)} + 1 \right]^{-1}, \quad (2.103)$$

Kao što je poznato [16], hemijski potencijal μ određuje se iz uslova održanja ukupnog broja elektrona:

$$N = 2 \sum_{\vec{k}} n_{\vec{k}} \quad (2.104)$$

U dugotalasnoj aproksimaciji i u oblasti niskih temperatura, iz (2.104) dobija se zavisnost hemijskog potencijala od temperature u implicitnom obliku

$$\mu^{3/2} \left[1 + \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{k_B T}{\mu} \right)^2 \right] = \mu_0^{3/2} \quad (2.105)$$

gde je $\mu_0 = (3\pi^2 N V^{-1})^{2/3} a^2 W$ - vrednost hemijskog potencijala na $T = 0 K$ tj. Fermijeva energija. Rešavanjem jednačine (2.105) do kvadratnih članova po temperaturi, dobija se eksplicitno:

$$\mu = \mu_0 \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{k_B T}{\mu_0} \right)^2 \right] \quad (2.106)$$

odakle se vidi da hemijski potencijal opada sa porastom temperature.

Unutrašnja energija elektronskog sistema može se izračunati kao termodinamička srednja vrednost hamiltonijana $U = \langle H \rangle$ tj.

$$\begin{aligned} U = V \sum_{\vec{n}} \langle a_{\vec{n}}^+ a_{\vec{n}} \rangle & - W \sum_{n_x, n_y, n_z} \left(\langle a_{n_x, n_y, n_z}^+ a_{n_x+1, n_y, n_z} \rangle + \langle a_{n_x, n_y, n_z}^+ a_{n_x-1, n_y, n_z} \rangle + \right. \\ & + \langle a_{n_x, n_y, n_z}^+ a_{n_x, n_y+1, n_z} \rangle + \langle a_{n_x, n_y, n_z}^+ a_{n_x, n_y-1, n_z} \rangle + \\ & \left. + \langle a_{n_x, n_y, n_z}^+ a_{n_x, n_y, n_z+1} \rangle + \langle a_{n_x, n_y, n_z}^+ a_{n_x, n_y, n_z-1} \rangle \right) \end{aligned} \quad (2.107)$$

Ovde je potrebno odrediti korelacione funkcije tipa:

$$\begin{aligned}\mathcal{K}_{n_x, n_y, n_z} &\equiv \langle a_{n_x, n_y, n_z}^+ a_{n_x, n_y, n_z} \rangle \\ \mathcal{K}_{n_x \pm 1, n_y, n_z} &\equiv \langle a_{n_x, n_y, n_z}^+ a_{n_x + 1, n_y, n_z} \rangle + \langle a_{n_x, n_y, n_z}^+ a_{n_x - 1, n_y, n_z} \rangle\end{aligned}\quad (2.108)$$

U prvom slučaju dobijamo:

$$\mathcal{K}_{n_x, n_y, n_z} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \int dE \frac{g_{\vec{k}}(E)}{e^{\beta(E-\mu)} + 1} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} n_{\vec{k}}$$

a u drugom:

$$\mathcal{K}_{n_x \pm 1, n_y, n_z} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} 2 \cos a_x k_x \int dE \frac{g_{\vec{k}}(E)}{e^{\beta(E-\mu)} + 1} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} 2 n_{\vec{k}} \cos a_x k_x$$

Koristeći slične izraze i za preostale korelacione funkcije u (2.107), kao i zakon disperzije (2.99), nakon neznatnih sređivanja, za unutrašnju energiju dobijamo sledeći izraz:

$$U = \sum_{\vec{k}} E_{\vec{k}} n_{\vec{k}} \quad (2.109)$$

Prelazeći sa sume na integral, u oblasti niskih temperatura i aproksimaciji malih talasnih vektora, za degenerisani elektronski gas se dobija,

$$U = \frac{V \mu^{5/2}}{10\pi^2 a^3 W^{3/2}} \left[1 + \frac{5\pi^2}{8} \left(\frac{k_B T}{\mu} \right)^2 \right] \quad (2.110)$$

Zamenjujući izraz (2.106) za hemijski potencijal u prethodnu jednačinu i njenim razvijanjem u red po temperaturi (do kvadratnih članova), unutrašnja energija postaje:

$$U = \frac{3}{5} N \mu_0^{5/2} \left[1 + \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{k_B T}{\mu_0} \right)^2 \right] \quad (2.111)$$

Diferenciranjem ovog izraza po temperaturi dobijamo specifičnu toplotu degenerisanog elektronskog gasa (po elementarnoj celiji):

$$\mathcal{C}_B^{el} \equiv \frac{1}{N} \frac{dU}{dT} = \frac{\pi^2 k_B^2}{2 \mu_0} T \quad (2.112)$$

Za razliku od kubne zavisnosti fononske specifične toplote, ovde se javlja linearna zavisnost u oblasti niskih temperatura [14].

2.2.3 Hajzenbergov feromagnet sa bikvadratnom interakcijom

Da bi se što tačnije opisale termomagnete osobine mnogih magnetnih materijala sa spinom $S \geq 1$ potrebno je pored „standardne“ Hajzenbergove interakcije izmene uvesti i bikvadratnu izmenu [25]. U najprostijem slučaju, sistema sa spinom $S = 1$, interakcije izmene se mogu potpuno opisati hamiltonijanom,

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{\vec{i}\vec{j}} I_{\vec{i}\vec{j}} \hat{\vec{S}}_{\vec{i}} \hat{\vec{S}}_{\vec{j}} - \frac{a}{2} \sum_{\vec{i}\vec{j}} I_{\vec{i}\vec{j}} \left(\hat{\vec{S}}_{\vec{i}} \hat{\vec{S}}_{\vec{j}} \right)^2 \quad (2.113)$$

gde su $\hat{\vec{S}}_{\vec{i}}$ spinski operatori na čvoru \vec{i} , $I_{\vec{i}\vec{j}}$ su interakcije izmene između spinova na čvorovima \vec{i} i \vec{j} dok je a parametar bikvadratne interakcije. Sledeći [28] uvodimo operatore kvadrupolnih momenata,

$$\begin{aligned} \hat{Q}^0 &= 3(\hat{S}^z)^2 - 2, & \hat{Q}^2 &= (\hat{S}^x)^2 - (\hat{S}^y)^2 \\ \hat{Q}^{xy} &= \hat{S}^x \hat{S}^y + \hat{S}^y \hat{S}^x, & \hat{Q}^{xz} &= \hat{S}^x \hat{S}^z + \hat{S}^z \hat{S}^x, & \hat{Q}^{yz} &= \hat{S}^y \hat{S}^z + \hat{S}^z \hat{S}^y \end{aligned} \quad (2.114)$$

Hamiltonijan (2.113) se može napisati u obliku,

$$\begin{aligned} \hat{H} &= -\frac{1}{2} \sum_{\vec{i}\vec{j}} I_{\vec{i}\vec{j}} \left(1 - \frac{a}{2} \right) \hat{\vec{S}}_{\vec{i}} \hat{\vec{S}}_{\vec{j}} - \\ &- \frac{a}{2} \sum_{\vec{i}\vec{j}} I_{\vec{i}\vec{j}} \left(\frac{1}{3} \hat{Q}_{\vec{i}}^0 \hat{Q}_{\vec{j}}^0 + \hat{Q}_{\vec{i}}^2 \hat{Q}_{\vec{j}}^2 + \hat{Q}_{\vec{i}}^{xy} \hat{Q}_{\vec{j}}^{xy} + \hat{Q}_{\vec{i}}^{xz} \hat{Q}_{\vec{j}}^{xz} + \hat{Q}_{\vec{i}}^{yz} \hat{Q}_{\vec{j}}^{yz} \right) \end{aligned} \quad (2.115)$$

Termomagneta svojstva beskonačnog feromagnetika ($I > 0$) ovde ćemo analizirati u aproksimaciji srednjeg polja. U tom slučaju, jednojonski hamiltonijan, za prostu kubnu strukturu $\hat{H}_{MF} = \hat{H}/(N_x N_y N_z)$ predstavlja Izingov hamiltonijan,

$$\hat{H}_{MF} = - \left(1 - \frac{a}{2} \right) I(0) \sigma_z \hat{S}_z - \frac{a}{6} I(0) q_0 \hat{Q}^0 \quad (2.116)$$

gde je $I(0) = 6I$ za prostu kubnu strukturu u aproksimaciji najbližih suseda. Srednje vrednosti dipolnog $\sigma_z \equiv \langle \hat{S}_z \rangle$ i kvadrupolnog $q_0 \equiv \langle \hat{Q}^0 \rangle$ momenta, koje imaju ulogu parametara uređenosti, mogu se odrediti iz uslova minimuma Gibsove slobodne energije,

$$F = -\Theta \ln Z - \frac{1}{2} \langle H_{MF} \rangle \quad (2.117)$$

Za hamiltonijan (2.116), unutrašnja energija $U = \langle \hat{H}_{MF} \rangle / 2$ data je izrazom,

$$U = -\frac{1}{2} I(0) \left(1 - \frac{a}{2} \right) \sigma_z^2 - \frac{a}{12} I(0) q_0^2 \quad (2.118)$$

dok je particona funkcija

$$Z = \text{Tr} \left(e^{-\hat{H}_{MF}/\Theta} \right) = e^{-aI(0)q_0/(3\Theta)} \left\{ 1 + e^{aI(0)q_0/(2\Theta)} \cosh \left[\frac{2-a}{\Theta} I(0) \sigma_z \right] \right\} \quad (2.119)$$

Uvrštavajući (2.118) i (2.119) u (2.117), za slobodnu energiju dobijamo,

$$F = \frac{1}{4} I(0)(2 - a) \sigma_z^2 + \frac{a}{3} q_0 + \frac{a}{12} q_0^2 - t \ln \left[1 + 2e^{aq_0/2t} \cosh \left(\frac{2-a}{2t} \sigma_z \right) \right] \quad (2.120)$$

gde je $t = \Theta/I(0)$ bezdimenziona „temperatura”.

Iz uslova minimuma slobodne energije (2.120),

$$\frac{\partial F}{\partial \sigma_z} = \frac{\partial F}{\partial q_0} = 0 \quad (2.121)$$

dobija se sledeći sistem samosaglasnih jednačina za parametre uređenosti:

$$\begin{aligned} \sigma_z &= \frac{2 \sinh \left(\frac{2-a}{2t} \sigma_z \right)}{e^{-aq_0/(2t)} + 2 \cosh \left(\frac{2-a}{2t} \sigma_z \right)} \\ q_0 &= \frac{6 \cosh \left(\frac{2-a}{2t} \sigma_z \right)}{e^{-aq_0/(2t)} + 2 \cosh \left(\frac{2-a}{2t} \sigma_z \right)} \end{aligned} \quad (2.122)$$

Numeričkim rešavanjem ovih jednačina za različite vrednosti parametra bikvadratne interakcije, utvrđeno je da, pored trivijalnog $\sigma_z = q_0 = 0$, postoje i rešenja:

$$(1) \sigma_z \neq 0, q_0 \neq 0 \quad (2) \sigma_z = 0, q_0 \neq 0 \quad (2.123)$$

Takođe je utvrđeno da za $0 \leq a < 1$, rešenje (1) daje nižu slobodnu energiju; dok je za $a > 1$ to slučaj sa drugim rešenjem. Za $a = 1$ sistem ima dva degenerisana rešenja.

Pomoću sistema jednačina (2.122) može se ispitati temperaturska zavisnost parametara uređenosti σ_z i q_0 kako za feromagnetsko uređenje tako i za ferokvadrupolno uređenje. Nešto detaljnijom analizom jednačina (2.122) dobija se i zavisnost kritične temperature (T_C) od parametra bikvadratne interakcije tj. fazni dijagram.

Poznavanje temperaturske zavisnosti parametara uređenosti omogućava da se ispitaju specifična toplota posmatranog sistema i magnonski spektri na proizvoljnoj temperaturi $0 \leq T < T_C$.

Diferenciranjem izraza za unutrašnju energiju po temperaturi, za specifičnu toplotu u jedinicama k_B dobijamo,

$$C_V = - \left(1 - \frac{a}{2} \right) \sigma_z \frac{d\sigma_z}{dt} - \frac{a}{6} q_0 \frac{dq_0}{dt} \quad (2.124)$$

Pošto se na niskim temperaturama ($t \simeq 0$) srednje vrednosti dipolnog i kvadrupolnog momenta slabo menjaju sa temperaturom, odmah možemo zaključiti da je na apsolutnoj nuli $C_V = 0$. Iznad kritične temperature, tj. u neuređenoj fazi, specifična toplota je takođe jednaka nuli. Temperaturska zavisnost specifične toplote može se ispitati jedino numerički - pomoću jednačine (2.124) za različite vrednosti parametra a . Pokazuje se da za $a < 2/3$, specifična toplota trpi konačan skok na kritičnoj temperaturi, što znači da se radi o faznim prelazima druge vrste [29]. Za $a > 2/3$ imamo fazne prelaze prve vrste jer specifična toplota neograničeno raste u blizini kritične temperature. Na osnovu toga može se zaključiti da pri $a = 2/3$ dolazi do promene vrste faznih prelaza tj. kod masivnog feromagnetička sa bikvadratnom interakcijom postoji trikritična tačka.

Spektar elementarnih eksitacija na proizvoljnoj temperaturi može se odrediti na sledeći način. Najpre se formiraju jednačine kretanja,

$$i\hbar \frac{d\hat{B}_{\vec{m}}}{dt} = [\hat{B}_{\vec{m}}, \hat{H}] \quad (2.125)$$

za operatore: $\hat{B}_{\vec{m}}^{(1)} = \hat{S}_{\vec{m}}^{(+)}$ i $\hat{B}_{\vec{m}}^{(2)} = \hat{S}_{\vec{m}}^+ \hat{S}_{\vec{m}}^- + \hat{S}_{\vec{m}}^- \hat{S}_{\vec{m}}^+$. Koristeći hamiltonijan (2.113) u obliku,

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -\frac{1}{2} \sum_{\vec{i} \vec{j}} I_{\vec{i} \vec{j}} \left[\hat{S}_{\vec{i}}^+ \hat{S}_{\vec{j}}^- + \left(1 - \frac{a}{2}\right) \hat{S}_{\vec{i}}^z \hat{S}_{\vec{j}}^z \right] - \\ & -\frac{a}{2} \sum_{\vec{i} \vec{j}} I_{\vec{i} \vec{j}} \left[\frac{3}{2} (\hat{S}_{\vec{i}}^z)^2 (\hat{S}_{\vec{j}}^z)^2 - S(S+1)(\hat{S}_{\vec{i}}^z)^2 + \frac{1}{2} (\hat{S}_{\vec{i}}^+)^2 (\hat{S}_{\vec{j}}^-)^2 + \hat{S}_{\vec{i}}^+ \hat{S}_{\vec{i}}^z \hat{S}_{\vec{j}}^- \hat{S}_{\vec{j}}^z + \hat{S}_{\vec{i}}^z \hat{S}_{\vec{i}}^+ \hat{S}_{\vec{j}}^z \hat{S}_{\vec{j}}^- \right] \end{aligned} \quad (2.126)$$

nakon nešto dužih izračunavanja, dobijaju se jednačine:

$$\begin{aligned} [i\hbar \frac{d}{dt} - (1 - \frac{a}{2}) \sum_{\vec{i}} I_{\vec{m} \vec{i}} \sigma_{\vec{i}}] \hat{B}_{\vec{m}}^{(1)} + (1 - \frac{a}{2}) \sigma_{\vec{m}} \sum_{\vec{i}} I_{\vec{m} \vec{i}} \hat{B}_{\vec{i}}^{(1)} - \frac{a}{2} \sum_{\vec{i}} I_{\vec{m} \vec{i}} q_{\vec{i}} \hat{B}_{\vec{m}}^{(2)} + \frac{a}{2} q_{\vec{m}} \sum_{\vec{i}} I_{\vec{m} \vec{i}} \hat{B}_{\vec{i}}^{(2)} = 0 \\ (1 - \frac{a}{2}) q_{\vec{m}} \sum_{\vec{i}} I_{\vec{m} \vec{i}} \hat{B}_{\vec{i}}^{(1)} - \frac{a}{2} \sum_{\vec{i}} I_{\vec{m} \vec{i}} q_{\vec{i}} \hat{B}_{\vec{m}}^{(1)} + [i\hbar \frac{d}{dt} - (1 - \frac{a}{2}) \sum_{\vec{i}} I_{\vec{m} \vec{i}} \sigma_{\vec{i}}] \hat{B}_{\vec{m}}^{(2)} + \frac{a}{2} \sigma_{\vec{m}} \sum_{\vec{i}} I_{\vec{m} \vec{i}} \hat{B}_{\vec{i}}^{(2)} = 0 \end{aligned} \quad (2.127)$$

Sledeći korak je da se ove jednačine linearizuju, zbog čega se oba operatora $\hat{B}_{\vec{m}}$ uzimaju u obliku, $\hat{B}_{\vec{m}}(t) = \langle \hat{B}_{\vec{m}} \rangle_{MF} + \delta \hat{B}_{\vec{m}}(t)$, gde je $\langle \hat{B}_{\vec{m}} \rangle_{MF}$ srednja vrednost u aproksimaciji srednjeg polja, dok je $\delta \hat{B}_{\vec{m}}(t) = \hat{B}_{\vec{m}} e^{-i\omega t}$ fluktuirajući deo. Operatori $\hat{B}_{\vec{m}}$ se zahvaljujući translatornoj invarijantnosti mogu izraziti kao,

$$\hat{B}_{\vec{m}} = \frac{1}{\sqrt{N_x N_y N_z}} \sum_{\vec{k}} \hat{B}_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{m}} \quad (2.128)$$

Koristeći (2.128), sistem jednačina (2.127) linearizovan po $\delta \hat{B}$, postaje:

$$\begin{aligned} \left[\mathcal{E} - 6(1 - \frac{a}{2})\sigma(1 + Y_{\vec{k}}) \right] \hat{B}_{\vec{k}}^{(1)} + 3aq(Y_{\vec{k}} - 1) \hat{B}_{\vec{k}}^{(2)} = 0 \\ 3aq[(2 - a)Y_{\vec{k}} - 1] \hat{B}_{\vec{k}}^{(1)} + [\mathcal{E} + 3\sigma(aY_{\vec{k}} + a - 2)] \hat{B}_{\vec{k}}^{(2)} = 0 \end{aligned} \quad (2.129)$$

gde je $Y_{\vec{k}} \equiv (\cos a_x k_x + \cos a_y k_y + \cos a_z k_z)/3$ a uvedena je i bezzimenziona „energija” $\mathcal{E} \equiv \hbar\omega/I$. Pošto se radi o homogenom sistemu, njegova determinanta mora biti:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}^2 + 6\sigma(Y_{\vec{k}} - 2 + a)\mathcal{E} + \\ + 9(Y_{\vec{k}} - 1)\{\sigma^2(2 - a)[(Y_{\vec{k}} + 1)a - 2] - aq^2[(2 - a)Y_{\vec{k}} - a]\} = 0 \end{aligned} \quad (2.130)$$

Pomoću (2.130) i jednačina srednjeg polja (2.122) za parametre uređenosti može se odrediti magnonski spektar u različitim fazama na proizvoljnoj temperaturi. Radi kasnijih poređenja balkovskog spektra sa spektrom tankih filmova, ovde treba ispitati zavisnost energije od $Y(k_x, k_y) \equiv (\cos a_x k_x + \cos a_y k_y)/2$.

3 TERMODINAMIKA TANKIH FILMOVA

3.1 Fononi u tankim filmovima

Dinamika kristalne rešetke niskodimenzionih struktura, a pre svega tankih filmova, predmet je intenzivnog razmatranja poslednjih 30-tak godina. U poznatoj monografiji A.A. Maradudina [30] opisani su teorijski i eksperimentalni aspekti uticaja primesa, površina i međupovršina na oscilovanje kristala sa jednom ili dve granične površine. Pokazuje se da se uticaj površine na oscilatorna svojstva polubeskonačnog kristala može efikasno uračunati i uzimanjem uzorka u obliku filma dovoljno velike ali konačne debljine. Model tankog filma se takođe primenjuje i kod analize dinamičkih svojstava molekula adsorbovanih na supstratu koji se sastoji od drugih molekula. Pored toga, novije eksperimentalne tehnike [31], posebno epitaksije molekulskim mlazom, omogućile su dobijanje kako ultratankih filmova tako i ostalih niskodimenzionih sistema što, pored mogućnosti njihove raznovrsne primene [32], motiviše savremena eksperimentalna i teorijska istraživanja tankih filmova.

Zbog prostorne ograničenosti u jednoj, dve ili tri dimenzije, kod svih niskodimenzionih struktura evidentno je narušenje translacione simetrije. U slučaju tankih filmova, translaciona simetrija je narušena duž (z) pravca normalnog na granične površine; u slojevima (XY) filma sačuvana je dvodimenziona periodičnost. Narušenje translacione simetrije i prisustvo graničnih površina kod tankih filmova dovodi do deformacije spektra zapreminskih oscilacija koje se dobijaju pomoću Born-Karmanovih cikličkih graničnih uslova. S druge strane, u spektru se mogu pojaviti i površinski modovi čiji je broj mali u odnosu na broj zapreminskih fonona. Površinske oscilacije, čija amplituda brzo opada sa rastojanjem, mogu biti lokalizovane na jednom ili dva granična sloja. Na to su jasno ukazali proračuni vibracija rešetke tankih filmova molekulskih kristala [33, 34, 35] metodom atom-atomskih „6 - exp“ potencijala. Dobijeni su površinski modovi sa frekvencijama ispod balkovskih, tzv. akustički površinski fononi. Pored akustičkih fonona, kod tankih filmova jonskih kristala postoje i optički površinski fononi sa frekvencijama iznad zapreminskih [36]. Interesantno je da se u tom slučaju mogu pojaviti i mešani površinsko - zapreminski modovi koji se nazivaju kvazipovršinski. Postojanje ovih modova pokazano je numeričkim proračunom spektra dovoljno tankih filmova na bazi dinamičke matrice.

U svim radovima koji su do sada spomenuti, kao i u radovima [37, 38], prepostavlja se da su granične površine filma slobodne, tj. da se film dobija „isečanjem“ iz beskonačnog kristala. Međutim, struktura kristala u površinskim slojevima može se znatno razlikovati od njegove strukture u zapremini. Pošto atomi u površinskom sloju imaju manji broj najbližih, drugih itd. suseda, to će se sile koje na njih deluju razlikovati od sila u zapremini filma. Zbog toga će se dinamička svojstva atoma, kao što su srednji kvadrati pomeraja i srednji kvadrati brzina, razlikovati na površinama filma i u njegovoj unutrašnjosti. Rič [39] i Keli [40] su izračunali srednje kvadrate pomeraja za atome u blizini slobodne površine polubeskonačnog kristala sa prostom kubnom rešetkom u aproksimaciji najbližih suseda. Pokazano je da srednji kvadrati amplitude oscilovanja, za površinske atome imaju veću vrednost nego za atome u zapremini kristala. Taj rezultat je u skladu sa idejom da su površinski atomi slabije vezani od unutrašnjih atoma. Pored toga Rič je našao da se atom u petom atomskom sloju od površine, ponaša u sústini na isti način kao i atom u beskonačnom kristalu. Maradudin i dr. [41] su takođe razmatrali prostu kubnu

strukturu, ali su pored najbližih suseda u interakciju uključili i sledeće najbliže susede. Rezultati njihovih proračuna su ukazali na anizotropiju površine kristala. Dobijene su veće vrednosti srednjih kvadrata pomeraja u pravcu normale nego za pravce koji su paralelni graničnoj površini. Klark i dr. [42] su konstatovali da bi odgovarajuće izmene konstanti elastičnosti kod površinskih atoma mogle dovesti do znatno boljih slaganja sa eksperimentalnim rezultatima rasejanja niskoenergetskih elektrona (LEED) na površini kristala [43]. U LEED eksperimentima ispituje se temperaturska zavisnost intenziteta elastičnog rasejanja elektrona na površini kristala. U harmonijskoj aproksimaciji ova zavisnost je, preko Debaj-Valerovog faktora, određena srednjim kvadratima oscilovanja kod nekoliko prvih atomskih slojeva [44]. Na toj osnovi je konstatovano da površinski atomi imaju veće $\langle u^2 \rangle$ od atoma u dubini kristala a potvrđena je i anizotropija oscilovanja atoma na površini. Kod teorijskog razmatranja difracije niskoenergetskih elektrona na tankim filmovima treba uzeti u obzir granične uslove na površinama filma i anharmonijske efekte na visokim temperaturama. U radu [45] je pokazano da se oba zahteva mogu zadovoljiti u okvirima pseudoharmonijskog modela toplotnih oscilacija.

Srednje kvadrate brzina atoma teorijski su određivali Valis i Gazis [46] i Valis [47] za monoatomski lanac od 20 atoma sa slobodnim krajevima. U aproksimaciji najbližih suseda i niskotemperaturskom limesu, oni su zaključili da se srednji kvadrat brzine atoma smanjuje na krajevima lanca. Ovaj rezultat je posledica činjenice da atomi na krajevima učestvuju u manjem broju interakcija od unutrašnjih atoma. Srednji kavadrati brzina kao i srednji kvadrati pomeraja površinskih atoma mogu se eksperimentalno odrediti pomoću Mesbauerovog efekta [30]. Ako su rezonantna jezgra adsorbovana na površini kristala tada se iz merenja Debajeve temperature i Doplerovog pomaka drugog reda mogu odrediti $\langle u^2 \rangle$ i $\langle v^2 \rangle$, respektivno [27]. Za ispitivanje toplotnih oscilacija površinskih atoma danas se koristi tehnika RHEED (reflection high-energy electron diffraction) [48] o kojoj će biti reči kasnije (sekcija 3.6). Prisustvo graničnih površina kod tankih filmova dovodi konačno i do promene njegovih termodinamičkih funkcija. Maradudin i Valis [49, 50] su analizirali specifičnu toplotu na niskim temperaturama. Oni su pokazali da slobodne površine daju doprinos koji je proporcionalan njihovoj površini i kvadratu apsolutne temperature.

Harmonijsko oscilovanje kristalnih filmova u aproksimaciji najbližih suseda analizirano je ovde metodom dvovremenskih Grinovih funkcija. Najpre su određene dijagonalne komponente Grinove funkcije tipa pomeraj-pomeraj standardnom procedurom koja je zasnovana na jednačinama kretanja. Pomoću polova Grinove funkcije ispitani su fononski spektri tankih filmova i utvrđeni uslovi egzistencije površinskih stanja u posmatranom modelu. Takođe su određene lokalne gustine fononskih stanja i pomoću njih Debajeva frekvencija za tanke filmove. Dinamička svojstva atoma na slojevima tankih filmova opisana su srednjim kvadratnim pomerajima i brzinama. Konačno, analizirana su termodinamička svojstva kristalnih filmova, unutrašnja energija i specifična toplota [51, 52]. U toku svih ovih analiza stalno su vršena poređenja karakteristika tankih filmova i masivne strukture [53, 54] opisane u prethodnoj glavi.

3.2 Osnovne pretpostavke. Hamiltonijan modela

Fononski podsistem tankih kristalnih filmova ovde ćemo analizirati u harmonijskoj aproksimaciji i aproksimaciji najbližih suseda. Radi jednostavnosti posmatraćemo tetragonalnu strukturu sa konstantama rešetke $a_x \neq a_y \neq a_z$ i sa jednim atomom po elementarnoj ćeliji. Pretpostavljamo da je kristal beskonačan u XY ravnima dok je njegova debljina duž z -pravca ekstremno mala (desetak slojeva). U skladu sa ovim pretpostavkama, indeksi čvorova kristalne rešetke n_x, n_y i n_z se menjaju u sledećim intervalima:

$$n_{x/y} \in \begin{cases} \left[-\frac{1}{2}N_{x/y} + 1, \frac{1}{2}N_{x/y} \right] & N_{x/y} - \text{parno} \\ \left[-\frac{1}{2}(N_{x/y} - 1), \frac{1}{2}(N_{x/y} + 1) \right] & N_{x/y} - \text{neparno} \end{cases}$$

$$n_z \in [0, N_z], \quad N_x \approx N_y \sim 10^8, \quad N_z \ll (N_x, N_y). \quad (3.1)$$

Poslednji uslov označava da ne postoje slojevi za $n_z \geq N_z + 1$ tako da su odgovarajući fononski pomeraji jednaki nuli. Zbog pretpostavke o ekstremno maloj debljini, jasno je da takvi filmovi zahtevaju obavezno prisustvo supstrata. Međutim, pošto nas interesuju samo svojstva filma, pretpostavljamo da je supstrat „zamrznut”, tako da su fononski pomeraji sa indeksima $n_z \leq -1$ takođe jednaki nuli,

$$u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} = 0; \quad n_z \leq -1, \quad \wedge \quad n_z \geq N_z + 1 \quad (3.2)$$

Ukupan broj atoma u posmatranoj oblasti kristala očigledno iznosi $N_x N_y (N_z + 1)$.

Što se tiče dinamičkih karakteristika sistema ovde se pre svega pretpostavlja da se torzione Hukove konstante $C_{\vec{n}}^{\alpha\beta}$ ($\alpha \neq \beta$) mogu zanemariti u odnosu na konstante istezanja $C_{\vec{n}}^{\alpha\alpha}$ i da one faktički zavise samo od indeksa sloja n_z [37], tj.

$$C_{n_z}^{\alpha\beta} \cong C_{n_z}^{\alpha\alpha} \delta_{\alpha\beta} \equiv C_{n_z}^{\alpha}, \quad \alpha, \beta = (x, y, z)$$

Takođe se pretpostavlja da su konstante C_{-1}^{α} i $C_{N_z+1}^{\alpha}$ različite od nule, pošto one predstavljaju druge izvode potencijala koji fiksira granične atome za ostatak filma. Ovi potencijali se razlikuju na granicama i unutar filma što ćemo opisati pomoću dva fenomenološka parametra a i b . Ovi tzv. površinski parametri³ izražavaju relativnu promenu konstanti elastičnosti na granici filma sa vakuumom,

$$C_{N_z+1}^{\alpha} = C^{\alpha} (1 + a) \quad (3.3)$$

i na granici sa supstratom,

$$C_{-1}^{\alpha} = C^{\alpha} (1 + b) \quad (3.4)$$

gde je $C^{\alpha} \equiv C_{n_z}^{\alpha}$ - vrednost konstante elastičnosti unutar filma. Relacije (3.3) i (3.4) kao i pretpostavka (3.2) o fononskim pomerajima, predstavljaju zapravo granične uslove posmatranog problema.

³Koncept površinskih parametara pomoću kojih se opisuju površinski defekti kod konačnih kristala, uveden je [55] kod razmatranja magnetnih površinskih stanja.

Ovde će biti analizirani tanki filmovi sa sledećim graničnim uslovima:

1. film sa idealnim površinama

$$a = b = 0, \quad (3.5)$$

što odgovara idealnoj situaciji u kojoj se Hukove konstante u graničnim slojevima ne menjaju. Ovaj slučaj značajan je za praktičnu analizu samo onda ako deformaciju filma tretiramo kao perturbaciju. Tada rešenja sa graničnim uslovima (3.5) služe kao nulta aproksimacija [38].

2. film sa slobodnim površinama

$$a = b = -1 \quad (3.6)$$

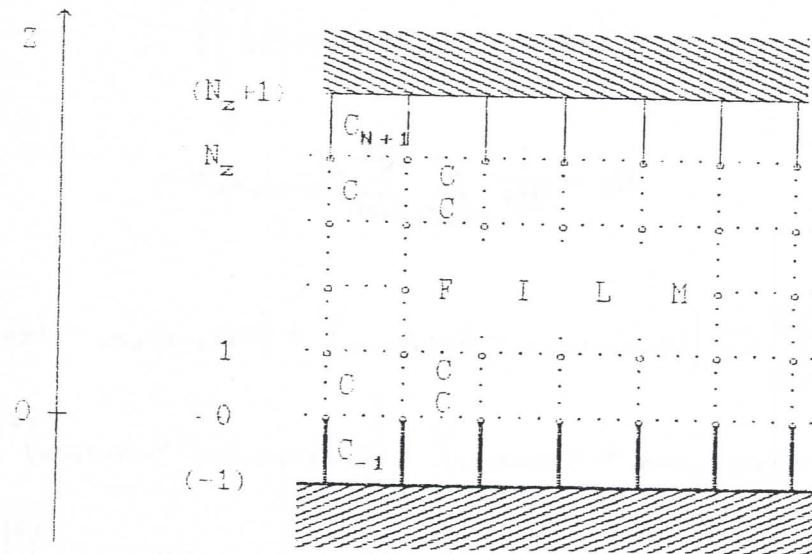
Ovaj slučaj je najčešće razmatran u literaturi [35, 41, 56].

3. kvazipolubeskonačan film

$$a = 0, \quad b = -1 \quad (3.7)$$

Izraz „polubeskonačan“ upotrebljava se zbog toga što pri $N_z \gg 1$, film prelazi u realnu polubeskonačnu strukturu.

Osim navedenih slučajeva poznatih u literaturi, biće ispitan i opštiji slučaj sa „klizećim“ vrednostima površinskih parametara a i b sa posebnim osvrtom na situacije kada se granične Hukove konstante drastično razlikuju u odnosu na vrednosti koje imaju u unutrašnjosti filma. Na osnovu navedenih pretpostavki, na slici 3.1 je prikazan model tankog kristalnog filma sa ravnim graničnim površinama.



Sl.3.1 - Model tankog kristalnog filma.

Nakon što su formulisane osnovne pretpostavke, moguće je formirati harmonijski hamiltonijan fononskog podsistema u aproksimaciji najблиžih suseda. Zbog mogućih pogreški pri sastavljanju jednačina kretanja za Grinove funkcije, hamiltonijan ćemo rasštaviti na dva dela:

$$H = H_S + H_B \quad (3.8)$$

gde H_S - obuhvata granične slojeve, a H_B - unutrašnjost filma,

$$\begin{aligned} H_S = & \frac{1}{4} \sum_{\alpha, n_x, n_y} \left\{ 2 C_{-1}^{\alpha} u_{\alpha; n_x, n_y, 0}^2 + 2 C_{N_z+1}^{\alpha} u_{\alpha; n_x, n_y, N_z}^2 + \right. \\ & + C^{\alpha} \left[\left(u_{\alpha; n_x+1, n_y, 0} - u_{\alpha; n_x, n_y, 0} \right)^2 + \left(u_{\alpha; n_x-1, n_y, 0} - u_{\alpha; n_x, n_y, 0} \right)^2 + \right. \\ & + \left. \left. \left(u_{\alpha; n_x, n_y+1, 1} - u_{\alpha; n_x, n_y, 0} \right)^2 + \left(u_{\alpha; n_x, n_y-1, 0} - u_{\alpha; n_x, n_y, 0} \right)^2 + \right. \right. \\ & \left. \left. + \left(u_{\alpha; n_x, n_y, 1} - u_{\alpha; n_x, n_y, 0} \right)^2 \right] + \right. \end{aligned} \quad (3.9)$$

$$\begin{aligned} & + C^{\alpha} \left[\left(u_{\alpha; n_x+1, n_y, N_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, N_z} \right)^2 + \left(u_{\alpha; n_x-1, n_y, N_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, N_z} \right)^2 + \right. \\ & + \left. \left(u_{\alpha; n_x, n_y+1, N_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, N_z} \right)^2 + \left(u_{\alpha; n_x, n_y-1, N_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, N_z} \right)^2 + \right. \\ & \left. \left. + \left(u_{\alpha; n_x, n_y, N_z-1} - u_{\alpha; n_x, n_y, N_z} \right)^2 \right] \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} H_B = & \frac{1}{2M} \sum_{\alpha; n_x, n_y} \sum_{n_z=0}^{N_z} p_{\alpha; n_x, n_y, n_z}^2 + \\ & + \frac{1}{4} \sum_{\alpha; n_x, n_y} \sum_{n_z=1}^{N_z-1} C_{n_z}^{\alpha} \left[\left(u_{\alpha; n_x+1, n_y, n_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z} \right)^2 + \left(u_{\alpha; n_x-1, n_y, n_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z} \right)^2 + \right. \\ & + \left. \left(u_{\alpha; n_x, n_y+1, n_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z} \right)^2 + \left(u_{\alpha; n_x, n_y-1, n_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z} \right)^2 + \right. \\ & \left. \left. + \left(u_{\alpha; n_x, n_y, n_z+1} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z} \right)^2 + \left(u_{\alpha; n_x, n_y, n_z-1} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z} \right)^2 \right] . \right. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Ovde treba uzeti u obzir da su konstante C_{-1}^{α} i $C_{N_z+1}^{\alpha}$ izražene u obliku (3.3) i (3.4).

3.3 Proračun fononskih Grinovih funkcija

Koristeći hamiltonijan (3.8) izračunaćemo dvovremensku Grinovu funkciju tipa pomeraj-pomeraj,

$$G_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z}^{\alpha}(t) = \Theta(t) \langle [u_{\alpha; n_x, n_y, n_z}(t), u_{\alpha; m_x, m_y, m_z}(0)]_- \rangle \quad (3.11)$$

standardnom procedurom zasnovanom na jednačinama kretanja [2]. U tom cilju najpre treba izraz za Grinovu funkciju (3.11) dva puta diferencirati po vremenu uz korišćenje Hajzenbergovih jednačina kretanja za operatore fononskih pomeraja:

$$i\hbar \frac{d}{dt} u_{\alpha; n_x, n_y, n_z}(t) = [u_{\alpha; n_x, n_y, n_z}(t), H]_- = \frac{i\hbar}{M} p_{\alpha; n_x, n_y, n_z}(t) \quad (3.12)$$

i impulsa

$$i\hbar \frac{d}{dt} \left[\frac{i\hbar}{M} p_{\alpha; n_x, n_y, n_z}(t) \right] = \frac{i\hbar}{M} [p_{\alpha; n_x, n_y, n_z}(t), H]_- \quad (3.13)$$

Ovde se pojavljuju komutatori $[p_{\alpha; n_x, n_y, n_z}(t), H]_-$ koje moramo posebno izračunati za granice i za unutrašnjost filma:

$$\{n_z = 0\}$$

$$\begin{aligned} \frac{i\hbar}{M} [p_{\alpha; n_x, n_y, 0}, H]_- &= \frac{\hbar^2 C^{\alpha}}{M} \left(\frac{C_{-1}^{\alpha}}{C^{\alpha}} u_{\alpha; n_x, n_y, 0} + 5 u_{\alpha; n_x, n_y, 0} - \right. \\ &\quad \left. - u_{\alpha; n_x-1, n_y, 0} - u_{\alpha; n_x+1, n_y, 0} - u_{\alpha; n_x, n_y-1, 0} - u_{\alpha; n_x, n_y+1, 0} - u_{\alpha; n_x, n_y, 1} \right) \end{aligned} \quad (3.14)$$

$$\{n_z = N_z\}$$

$$\begin{aligned} \frac{i\hbar}{M} [p_{\alpha; n_x, n_y, N_z}, H]_- &= \frac{\hbar^2 C^{\alpha}}{M} \left(\frac{C_{N_z+1}^{\alpha}}{C^{\alpha}} u_{\alpha; n_x, n_y, N_z} + 5 u_{\alpha; n_x, n_y, N_z} - \right. \\ &\quad \left. - u_{\alpha; n_x-1, n_y, N_z} - u_{\alpha; n_x+1, n_y, N_z} - u_{\alpha; n_x, n_y-1, N_z} - u_{\alpha; n_x, n_y+1, N_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, N_z-1} \right), \end{aligned} \quad (3.15)$$

$$\{1 \leq n_z \leq N_z - 1\}$$

$$\begin{aligned} \frac{i\hbar}{M} [p_{\alpha; n_x, n_y, n_z}, H]_- &= \frac{\hbar^2 C^{\alpha}}{M} \left(6 u_{\alpha; n_x, n_y, n_z} - u_{\alpha; n_x-1, n_y, n_z} - u_{\alpha; n_x+1, n_y, n_z} - \right. \\ &\quad \left. - u_{\alpha; n_x, n_y-1, n_z} - u_{\alpha; n_x, n_y+1, n_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z-1} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z+1} \right) \end{aligned} \quad (3.16)$$

Napomenimo da su zbog oblika jednačina (3.14) i (3.15) parametri a i b uvedeni kao relativne korekcije (3.3) i (3.4) Hukovih konstanti na granicama filma.

Pomoću komutatora (3.14 – 3.16) dobijamo sledeći sistem diferencno-diferencijalnih jednačina drugog reda za tražene Grinove funkcije:

$$\{n_z = 0\}$$

$$\begin{aligned}
 & -\frac{d^2}{dt^2} G_{n_x, n_y, 0; m_x, m_y, m_z}^\alpha(t) = \frac{i\hbar}{M} \delta(t) \delta_{n_x, n_y, 0; m_x, m_y, m_z} + \\
 & + \frac{C^\alpha}{M} [(1+a) G_{n_x, n_y, 0; m_x, m_y, m_z}^\alpha(t) + 5 G_{n_x, n_y, 0; m_x, m_y, m_z}^\alpha(t) - \\
 & - G_{n_x-1, n_y, 0; m_x, m_y, m_z}^\alpha(t) - G_{n_x+1, n_y, 0; m_x, m_y, m_z}^\alpha(t) - \\
 & - G_{n_x, n_y-1, 0; m_x, m_y, m_z}^\alpha(t) - G_{n_x, n_y+1, 0; m_x, m_y, m_z}^\alpha(t) - G_{n_x, n_y, 1; m_x, m_y, m_z}^\alpha(t)] \tag{3.17}
 \end{aligned}$$

$$\{n_z = N_z\}$$

$$\begin{aligned}
 & -\frac{d^2}{dt^2} G_{n_x, n_y, N_z; m_x, m_y, m_z}^\alpha(t) = \frac{i\hbar}{M} \delta(t) \delta_{n_x, n_y, N_z; m_x, m_y, m_z} + \\
 & + \frac{C^\alpha}{M} [(1+b) G_{n_x, n_y, N_z; m_x, m_y, m_z}^\alpha(t) + 5 G_{n_x, n_y, N_z; m_x, m_y, m_z}^\alpha(t) - \\
 & - G_{n_x-1, n_y, N_z; m_x, m_y, m_z}^\alpha(t) - G_{n_x+1, n_y, N_z; m_x, m_y, m_z}^\alpha(t) - \\
 & - G_{n_x, n_y-1, N_z; m_x, m_y, m_z}^\alpha(t) - G_{n_x, n_y+1, N_z; m_x, m_y, m_z}^\alpha(t) - G_{n_x, n_y, N_z-1; m_x, m_y, m_z}^\alpha(t)] \tag{3.18}
 \end{aligned}$$

$$\{1 \leq n_z \leq N_z - 1\}$$

$$\begin{aligned}
 & -\frac{d^2}{dt^2} G_{n_x, n_y, n_z; m_x, m_y, m_z}^\alpha(t) = \frac{i\hbar}{M} \delta(t) \delta_{n_x, n_y, n_z; m_x, m_y, m_z} + \\
 & + \frac{C^\alpha}{M} [6 G_{n_x, n_y, n_z; m_x, m_y, m_z}^\alpha(t) - \tag{3.19}
 \end{aligned}$$

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

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

$$- G_{n_x, n_y, n_z-1; m_x, m_y, m_z}^\alpha(t) - G_{n_x, n_y, n_z+1; m_x, m_y, m_z}^\alpha(t)]$$

Dobijeni sistem jednačina se može pojednostaviti primenom Furije transformacija vreme - frekvencija:

$$G_{n_x, n_y, n_z; m_x, m_y, m_z}^{\alpha}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} G_{n_x, n_y, n_z; m_x, m_y, m_z}^{\alpha}(\omega), \quad (3.20)$$

$$\delta(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t}$$

Pored toga, zahvaljujući svojstvima translacione invarijantnosti u ravnima koje su paralelne sa graničnim površinama filma, mogu se uvesti i dvodimenzione Furije transformacije prostor - talasni vektor:

$$G_{n_x, n_y, n_z; m_x, m_y, m_z}^{\alpha}(\omega) = \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x, k_y} e^{i[k_x a_x(n_x - m_x) + k_y a_y(n_y - m_y)]} G_{n_z; m_z}^{\alpha}(k_x, k_y; \omega) \quad (3.21)$$

pri čemu je:

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

Uvrštavajući (3.20) i (3.21) u (3.17 – 3.19) dobijamo sledeći sistem jednačina:

18)

$$(\rho_{\alpha} - a) G_{0, m_z}^{\alpha}(k_x, k_y; \omega) + G_{1, m_z}^{\alpha}(k_x, k_y; \omega) = \mathcal{K}_{\alpha} \delta_{0, m_z}$$

$$\begin{aligned} G_{0, m_z}^{\alpha}(k_x, k_y; \omega) + \rho_{\alpha} G_{1, m_z}^{\alpha}(k_x, k_y; \omega) + G_{2, m_z}^{\alpha}(k_x, k_y; \omega) &= \mathcal{K}_{\alpha} \delta_{1, m_z} \\ G_{1, m_z}^{\alpha}(k_x, k_y; \omega) + \rho_{\alpha} G_{2, m_z}^{\alpha}(k_x, k_y; \omega) + G_{3, m_z}^{\alpha}(k_x, k_y; \omega) &= \mathcal{K}_{\alpha} \delta_{2, m_z} \end{aligned}$$

$$G_{n_z-1, m_z}^{\alpha}(k_x, k_y; \omega) + \rho_{\alpha} G_{n_z, m_z}^{\alpha}(k_x, k_y; \omega) + G_{n_z+1, m_z}^{\alpha}(k_x, k_y; \omega) = \mathcal{K}_{\alpha} \delta_{n_z, m_z} \quad (3.22)$$

$$G_{N_z-3, m_z}^{\alpha}(k_x, k_y; \omega) + \rho_{\alpha} G_{N_z-2, m_z}^{\alpha}(k_x, k_y; \omega) + G_{N_z-1, m_z}^{\alpha}(k_x, k_y; \omega) = \mathcal{K}_{\alpha} \delta_{N_z-2, m_z}$$

$$G_{N_z-2, m_z}^{\alpha}(k_x, k_y; \omega) + \rho_{\alpha} G_{N_z-1, m_z}^{\alpha}(k_x, k_y; \omega) + G_{N_z, m_z}^{\alpha}(k_x, k_y; \omega) = \mathcal{K}_{\alpha} \delta_{N_z-1, m_z}$$

$$G_{N_z-1, m_z}^{\alpha}(k_x, k_y; \omega) + (\rho_{\alpha} - b) G_{N_z, m_z}^{\alpha}(k_x, k_y; \omega) = \mathcal{K}_{\alpha} \delta_{N_z, m_z}$$

Ovde je $\mathcal{K}_{\alpha} \equiv \frac{i\hbar}{2\pi C^{\alpha}}$, dok je:

$$\rho^{\alpha} \equiv \frac{M\omega^2}{C^{\alpha}} - 6 + 2 (\cos ak_x + \cos ak_y). \quad (3.23)$$

Sistem jednačina (3.22) se može napisati u matričnoj formi

$$\mathcal{D}_{N_z+1}^\alpha(\rho_\alpha; a, b) \mathcal{G}_{m_z}^\alpha(\rho_\alpha) = \mathcal{K}_{m_z}^\alpha \quad (3.24)$$

gde su $\mathcal{G}_{m_z}^\alpha(\rho_\alpha)$ i $\mathcal{K}_{m_z}^\alpha$ matrice-kolone

$$\mathcal{G}_{m_z}^\alpha(\rho_\alpha) \equiv \begin{pmatrix} G_{0,m_z}^\alpha(k_x, k_y; \omega) \\ G_{1,m_z}^\alpha(k_x, k_y; \omega) \\ \vdots \\ G_{N_z,m_z}^\alpha(k_x, k_y; \omega) \end{pmatrix}; \quad \mathcal{K}_{m_z}^\alpha \equiv \mathcal{K}_\alpha \begin{pmatrix} \delta_{0,m_z} \\ \delta_{1,m_z} \\ \vdots \\ \delta_{N_z,m_z} \end{pmatrix} \quad (3.25)$$

Determinanta sistema (3.24) ima tridiagonalni oblik,

$$D_{N_z+1}(\rho^\alpha; a, b) = \begin{vmatrix} \rho^\alpha - a & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & \rho^\alpha & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \rho^\alpha & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & \rho^\alpha & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & \rho^\alpha & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & \rho^\alpha - b \end{vmatrix}_{N_z+1} \quad (3.26)$$

$N_z + 1$ označava dimenziju determinante koja je jednaka broju slojeva u filmu. Nije teško videti da je

$$D_{N_z+1}(\rho^\alpha; a, b) = \mathcal{C}_{N_z+1}(\rho^\alpha) - (a + b) \mathcal{C}_{N_z}(\rho^\alpha) + a b \mathcal{C}_{N_z-1}(\rho^\alpha) \quad (3.27)$$

gde su $\mathcal{C}_n(\rho) \equiv D_n(\rho; 0, 0)$ polinomi tipa Čebiševa⁴,

$$\mathcal{C}_n(\rho) = \begin{vmatrix} \rho & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & \rho & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \rho & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & \rho & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & \rho & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & \rho \end{vmatrix}_n \quad (3.28)$$

Polinomi (3.28) zadovoljavaju sledeću rekurzivnu relaciju,

$$\mathcal{C}_{n+1}(\rho) = \rho \mathcal{C}_n(\rho) - \mathcal{C}_{n-1}(\rho)$$

uz početne uslove: $\mathcal{C}_0(\rho) = 1$, $\mathcal{C}_1(\rho) = \rho$.

⁴Videti Dodatak A.1

Rešavanjem sistema jednačina (3.22), mogu se dobiti potrebne Grinove funkcije i to:

- dijagonalne:

$$G_{m_z, m_z}^{\alpha}(k_x, k_y; \omega) = \mathcal{K}_{\alpha} \frac{\mathcal{A}_{m_z}(\rho^{\alpha}; a) \mathcal{A}_{N_z - m_z}(\rho^{\alpha}; b)}{D_{N_z + 1}(\rho^{\alpha}; a, b)} \quad (3.29)$$

koje se koriste za opisivanje ravnotežnih svojstava tankih filmova i

- nedijagonalne:

$$G_{m_z - 1, m_z}^{\alpha}(k_x, k_y; \omega) = -\mathcal{K}_{\alpha} \frac{\mathcal{A}_{m_z - 1}(\rho^z; a) \mathcal{A}_{N_z - m_z}(\rho^{\alpha}; b)}{D_{N_z + 1}(\rho^{\alpha}; a, b)} \quad (3.30)$$

pomoću kojih se opisuju neravnotežni procesi. Polinomi $\mathcal{A}_n(\rho; a)$ se mogu izraziti pomoću karakterističnih polinoma (3.28):

$$\mathcal{A}_n(\rho; a) = \begin{vmatrix} \rho - a & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & \rho & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \rho & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & \rho & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & \rho & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & \rho \end{vmatrix}_n = (\rho - a)\mathcal{C}_{n-1}(\rho) - \mathcal{C}_{n-2}(\rho) \quad (3.31)$$

Iz (3.29) i (3.30) vidimo da su Grinove funkcije prave racionalne funkcije što omogućava njihovu dalju transformaciju. U tom cilju, potrebno je pre svega odrediti njihove polove koji predstavljaju realne i jednostrukе korene polinoma:

Nije

3.27)

$$D_{N_z + 1}(\rho^{\alpha}; a, b) = 0 \Rightarrow \rho_{\nu}^{\alpha}, \quad \nu = 1, 2, \dots, N_z + 1 \quad (3.32)$$

Oni se analitički mogu odrediti jedino u modelima graničnih uslova (3.5 – 3.7). Za proizvoljne vrednosti površinskih parametara a i b , koreni polinoma (3.27) mogu se izračunati samo numerički. Poznavanje ovih korena, omogućava da se Grinove funkcije (3.29) i (3.30) faktorizuju na parcijalne razlomke [18]:

3.28)

$$G_{n_z, m_z}^{\alpha}(k_x, k_y; \omega) = \mathcal{K}_{\alpha} \sum_{\nu=1}^{N_z + 1} \frac{g_{n_z, m_z}^{\alpha}(\rho_{\nu}^{\alpha})}{\rho - \rho_{\nu}^{\alpha}} \quad (3.33)$$

tj. da se prikažu u vidu sume konačnog broja Grinovih funkcija za dvodimenzionu rešetku.

Koeficijenti $g_{n_z, m_z}(\rho_\nu)$, koji se nazivaju spektralne težine Grinove funkcije [15], određeni su izrazima:

$$\begin{aligned} g_{m_z, m_z}^\alpha(\rho_\nu^\alpha) &= \mathcal{A}_{m_z}(\rho_\nu^\alpha) \mathcal{A}_{N_z - m_z}(\rho_\nu^\alpha) \left\{ \frac{d}{d\rho} [D_{N_z+1}(\rho^\alpha)]_{\rho=\rho_\nu^\alpha} \right\}^{-1} \\ g_{m_z-1, m_z}^\alpha(\rho_\nu^\alpha) &= -\mathcal{A}_{m_z-1}(\rho_\nu^\alpha) \mathcal{A}_{N_z - m_z}(\rho_\nu^\alpha) \left\{ \frac{d}{d\rho} [D_{N_z+1}(\rho^\alpha)]_{\rho=\rho_\nu^\alpha} \right\}^{-1} \end{aligned} \quad (3.34)$$

Koristeći relaciju (3.23) u izraz (3.33) možemo eksplicitno uvesti frekvenciju,

$$\frac{1}{\rho - \rho_\nu^\alpha} = \frac{(\Omega_0^\alpha)^2}{2 \omega_\nu^\alpha(k_x, k_y)} \left(\frac{1}{\omega - \omega_\nu^\alpha(k_x, k_y)} - \frac{1}{\omega + \omega_\nu^\alpha(k_x, k_y)} \right) \quad (3.35)$$

gde je $\Omega_0^\alpha = (C^\alpha/M)^{1/2}$, a

$$\omega_\nu^\alpha(k_x, k_y) = \Omega_0^\alpha [6 - 2 (\cos a_x k_x + \cos a_y k_y) + \rho_\nu^{\alpha 1/2}]^{1/2} \quad (3.36)$$

Na taj način konačno dobijamo izraz za Grinove funkcije u aplikativnoj formi,

$$\begin{aligned} G_{n_z, m_z}^\alpha(k_x, k_y; \omega) &= \frac{i\hbar}{4\pi} \sum_{\nu=1}^{N_z+1} \frac{g_{n_z, m_z}^\alpha(\rho_\nu^\alpha)}{\omega_\nu^\alpha(k_x, k_y)} \left(\frac{1}{\omega - \omega_\nu^\alpha(k_x, k_y)} - \frac{1}{\omega + \omega_\nu^\alpha(k_x, k_y)} \right) \\ &\quad (\alpha = x, y, z; \quad n_z = m_z, m_z - 1) \end{aligned} \quad (3.37)$$

Rezimirajući prethodne proračune treba istaći da je za potpuno poznavanje fononske Grinove funkcije tankih filmova, pored zakona disperzije (3.36) potrebno znati nule ρ_ν^α polinoma (3.27) i vrednosti spektralnih težina $g_{n_z, n_z}(\rho_\nu^\alpha)$ na svakom sloju filma za svaku nulu ρ_ν . Time je zaokružen proračun Grinovih funkcija, pa možemo preći na ispitivanje ravnotežnih mikroskopskih i makroskopskih svojstava fononskog pod sistema tankih kristalnih filmova.

Pre nego što predemo na ove analize, treba spomenuti i dva korisna svojstva dijagonalnih Grinovih funkcija za tanke filmove. Naime, polazeći od pravila sume (2.45) za fononske Grinove funkcije, koje u ovom slučaju ima sličan oblik,

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \omega G_{n_z, n_z}^\alpha(k_x, k_y; \omega) = \frac{\hbar}{2M} N_x N_y \quad (3.38)$$

i koristeći relaciju (3.37) može se pokazati da spektralne težine $g_{n_z, n_z}(\rho_\nu^\alpha)$ zadovoljavaju relaciju:

$$\sum_{\nu=1}^{N_z+1} g_{n_z, n_z}(\rho_\nu^\alpha) = 1, \quad \forall n_z = 0, 1, \dots, N_z \quad (3.39)$$

koja pokazuje da su spektralne težine normirane na svakom sloju filma. Pored toga, pomoću relacije (3.38) neposredno se pokazuje i da je

$$\sum_{n_z=0}^{N_z} g_{n_z, n_z}(\rho_\nu^\alpha) = 1, \quad \forall \nu = 1, 2, \dots, N_z + 1. \quad (3.40)$$

3.4 Fononski spektri

Fononske spektre tankih filmova sada ćemo detaljno analizirati pomoću zakona disperzije (3.36) koji se može napisati u pogodnijem obliku:

$$\omega_\nu^\alpha(k_x, k_y) = 2 \Omega_0^\alpha \sqrt{\Delta_\nu^\alpha + \sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y}{2}}, \quad (3.41)$$

gde je $\Delta_\nu^\alpha = 2 + \rho_\nu^\alpha$, $\alpha = x, y, z$. Iz analize sličnog problema preko molekulskih pomeraja [37, 38], kada se dobija sistem homogenih jednačina i zahteva da sekularna jednačina bude jednak nuli, zna se da postoje dva tipa pomeraja: **zapreminski**, koji su prisutni na svakom sloju duž z pravca, i **površinski** koji su lokalizovani uz jednu ili obe granične površine. (Kod površinskih stanja molekuli u unutrašnjosti praktično ne osciluju.) Za prvi slučaj koristi se termin zapreminska fononska stanja a za drugi površinska fononska stanja. Od zapreminskih na površinska fononska stanja prelazi se tako što se dopušta da realna (z) komponenta talasnog vektora može da ima i čisto imaginarnu vrednost. Tada je pomeraj proporcionalan izrazu $\exp(-n_z \kappa)$ pri čemu, očigledno, κ mora biti pozitivno. Pozitivan znak parametra κ je uslov egzistencije površinskih stanja. Ovde je analiza vršena preko Grinovih funkcija što pruža posebne mogućnosti da se ispituju uslovi egzistencije zapreminskih i površinskih fononskih stanja. Pored toga, ovde ćemo analizirati najnižu frekvenciju zapreminskih fononskih stanja koja se dobija iz (3.41) za $k_x = k_y = 0$ i $-2 \leq \rho_\nu \leq 2$. Zavisno od izabranih graničnih uslova i debljine filma, najniža frekvencija („prag“) može imati različite vrednosti. Ovaj zaključak ima veliku praktičnu vrednost jer se nametanjem spoljašnjih uslova površinski parametri mogu dovesti na željene vrednosti koje bi davale što veći prag frekvencije. Egzistencija praga znači da takav materijal ima dobru zvučnu izolaciju i da mu je apsolutna temperatura na kojoj je superprovodan, ako je metal, pomerena ka nekoj većoj ili manjoj pozitivnoj vrednosti. Tada je ovaj metal idealan električni provodnik sve do te vrednosti temperature na kojoj se pojavljuju fononi.

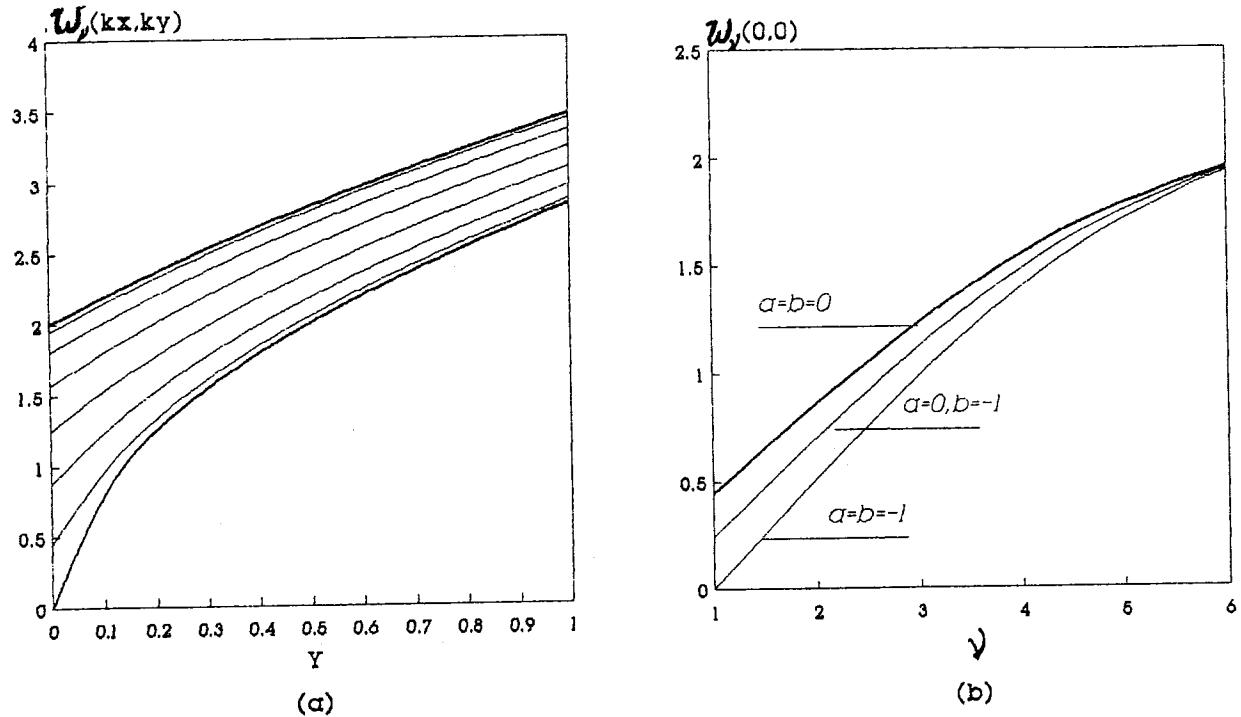
3.4.1 Zapreminska fononska stanja

Zbog konačne debljine kristalnog filma, vrednosti talasnog vektora duž z - pravca kao i odgovarajuće frekvencije, moraju biti diskretne. Ova činjenica je poznata u literaturi [57] pod nazivom dimenziona kvantizacija. Pošto komponente kvaziimpulsa k_x i k_y mogu imati proizvoljne vrednosti, fononski spektar tankih filmova je kvazidiskretan tj. raspada se na dvodimenzione podzone. Za fonone sa takvim spektrima koristi se naziv konfinovani fononi [58]. Ovde je izvršen proračun frekvencija zapreminskih stanja po formuli (3.41) u funkciji parametra $Y(k_x, k_y) = (\sin^2 ak_x/2 + \sin^2 ak_y/2)/2$ za šestoslojni film ($N_z = 5$). Rezultati za film sa idealnim površinama (3.5), kada zakon disperzije (3.41) ima balkovsku formu:

$$\omega_\nu^\alpha(k_x, k_y) = 2 \Omega_0^\alpha \sqrt{2Y(k_x, k_y) + \sin^2 \frac{ak_z}{2}}, \quad k_z = \frac{\pi \nu}{2(N_z + 2)a} \quad (3.42)$$

($\nu = 1, 2, \dots, N_z + 1$) dati su na slici 3.2(a).

(3.40)



Sl.3.2 - (a) Fononski spektar šestoslojnog filma sa idealnim granicama,
 (b) Minimalne vrednosti fononskih frekvencija za različite modele graničnih uslova.

Sa ove slike se vidi da su sve podzone unutar balkovskih granica ($\rho = \pm 2$) koje su prikazane punim linijama i da je najniža frekvencija različita od nule. Minimalne vrednosti frekvencija dimenzionalih podzona određene su u ovom slučaju izrazom:

$$\Delta_\nu = 4 \sin^2 \left[\frac{\pi \nu}{2(N_z + 2)} \right]; \quad \nu = 1, 2, \dots, N_z + 1 \quad (3.43)$$

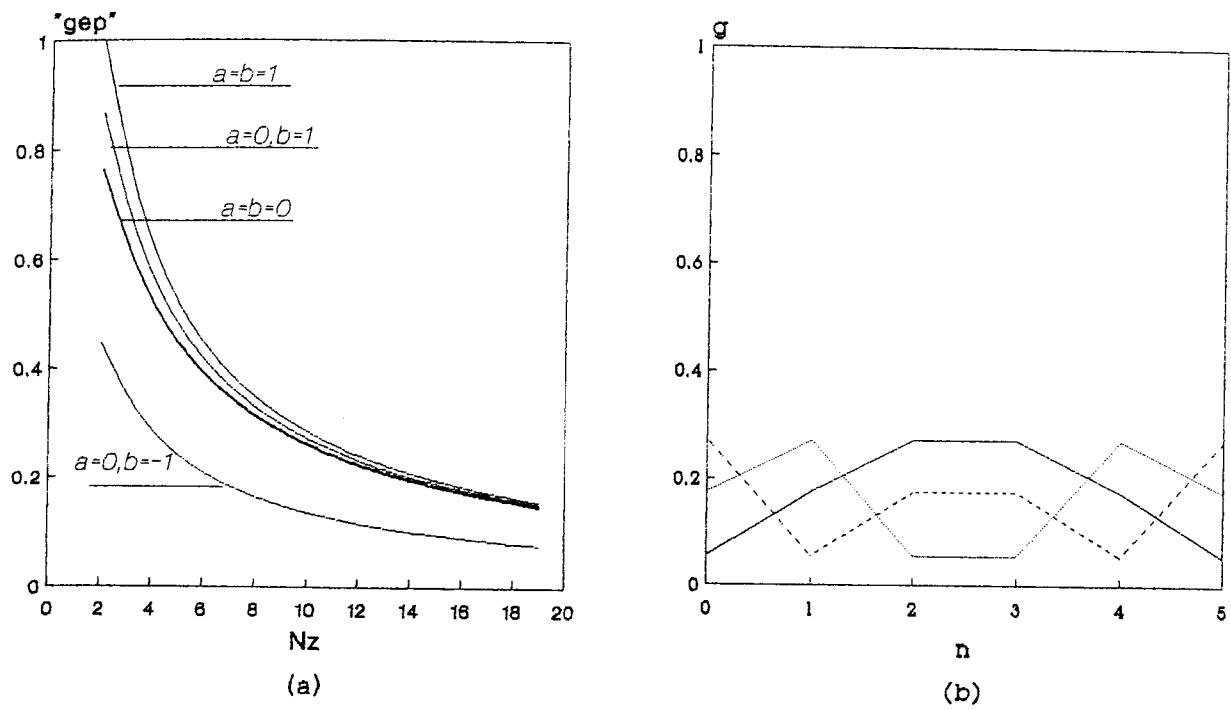
Kod filma sa slobodnim površinama (3.6) minimalne frekvencije imaju vrednosti:

$$\Delta_\nu = 4 \sin^2 \left[\frac{\pi(\nu - 1)}{2(N_z + 1)} \right]; \quad \nu = 1, 2, \dots, N_z + 1 \quad (3.44)$$

dok je kod kvazipolubeskonačnog filma (3.7):

$$\Delta_\nu = 4 \sin^2 \left(\frac{2\pi\nu}{2N_z + 3} \right); \quad \nu = 1, 2, \dots, N_z + 1 \quad (3.45)$$

U svakom drugom slučaju, frekvencije $\Delta_\nu = 2 + \rho_\nu$ mogu se odrediti jedino numerički. Tri poslednja izraza određuju zapravo zavisnost fononskih frekvencija od dozvoljenih vrednosti kvaziimpulsa k_z pri $k_x = k_y = 0$. Ova zavisnost je prikazana na slici 3.2(b) za film od šest slojeva. Na slici se odmah uočava da je jedino kod filma sa slobodnim površinama minimalna frekvencija jednaka nula. Pored toga, na osnovu ove slike se može zaključiti da je kod tankih filmova uticaj granica značajan samo u centru Briluenove zone a da se na njenim krajevima može zanemariti.



Sl.3.3 - (a) Minimalna frekvencija v.s. debljina filma. (b) Distribucija spektralnih težina po slojevima filma pri $N_z = 5, a = b = 0$.

Rezultati nešto detaljnije analize uticaja graničnih uslova i debljine filma na minimalnu frekvenciju prikazani su na slici 3.3(a). Na slici je data zavisnost minimalne frekvencije od debljine filma pri različitim vrednostima površinskih parametara. Sa slike se vidi da smanjenje debljine filma i povećanje vrednosti Hukove konstante u graničnim slojevima dovodi do povećanja minimalne frekvencije. Nasuprot tome, smanjenje Hukove konstante u graničnim slojevima i povećanje debljine filma dovodi do njenog postepenog isčezavanja.

Na slici 3.3(b) prikazane su vrednosti spektralnih težina Grinove funkcije po slojevima šestoslojnog filma sa idealnim granicama za tri podzone spektra. Kod preostale tri podzone dobijaju se identične distribucije pošto se radi o filmu sa simetričnim granicama. Ove vrednosti spektralnih težina dobijene su pomoću izraza (3.34) koji u modelu idealnih granica ($a = b = 0$) ima oblik:

$$g_{n_z, n_z} = \frac{2}{N_z + 1} \sin^2 \left[(n_z + 1) \frac{\pi \nu}{N_z + 2} \right]; \quad \nu = 1, 2, \dots, N_z + 1 \quad (3.46)$$

Kod filma sa slobodnim površinama ($a = b = -1$) spektralne težine imaju vrednosti:

$$g_{n_z, n_z}(\rho_\nu) = \begin{cases} \frac{1}{N_z + 1}, & \nu = 1 \quad (\rho = -2) \\ \frac{2}{N_z + 1} \sin^2 \left[\left(n_z + \frac{1}{2} \right) \frac{\pi(\nu - 1)}{N_z + 1} \right], & \nu = 2, 3, \dots, N_z + 1 \end{cases} \quad (3.47)$$

Konačno, kod filma sa asimetričnim graničnim uslovima ($a = 0, b = -1$):

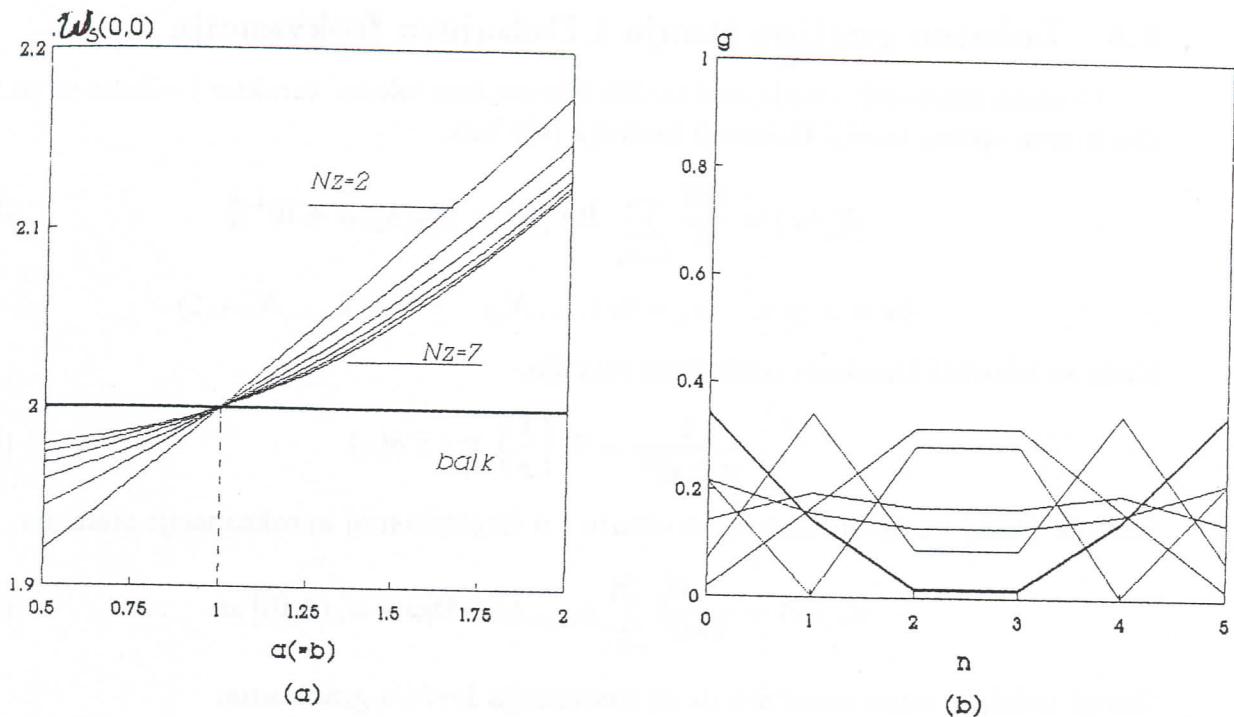
$$g_{n_z, n_z} = \frac{4}{2N_z + 1} \sin^2 \left[(n_z + 1) \frac{2\pi \nu}{2N_z + 3} \right]; \quad \nu = 1, 2, \dots, N_z + 1 \quad (3.48)$$

Na osnovu relacija (3.46 – 3.48) može se zaključiti da su kod sva tri modela graničnih uslova prisutna samo zapreminska fononska stanja koja su u vidu stojećih talasa distribuirana po slojevima filma. Za proizvoljne vrednosti površinskih parametara a i b , spektralne težine se mogu odrediti jedino numerički. U tom slučaju se mogu pojaviti i lokalizovana fononska stanja kod kojih spektralne težine imaju maksimum na jednoj ili obe granične površine filma dok u dubini filma imaju zanemarljivo male vrednosti.

3.4.2 Površinska fononska stanja

Pored zapreminskih oscilacija, kod polubeskonačnih kristala i tankih filmova mogu se pojaviti i površinske oscilacije kod kojih pomeraji eksponencijalno opadaju pri udaljavanju od površine u dubinu kristala. Takve oscilacije je uočio Reli (1887.) pri razmatranju prostiranja talasa u polubeskonačnom elastičnom kontinuumu. Za površinske relijevske talase je karakteristično da im frekvencija isčezava u graničnom slučaju beskonačno velikih talasnih dužina. Površinske oscilacije kod kristalnih struktura prvi su razmatrali Lifšic i Rozencvajg (1948.). Na primeru dvoatomnog polubeskonačnog kristala oni su pokazali da frekvencije površinskih oscilacija leže u procepu između akustičkih i optičkih grana spektra. Za razliku od polubeskonačnih struktura, kod kristala konačnih dimenzija površinske oscilacije se javljaju čak i u slučaju proste kubne strukture [47]. U ovom slučaju frekvencije površinskih modova leže iznad dozvoljenih vrednosti frekvencija oscilovanja masivnog kristala. U našem modelu tankih filmova, površinska stanja su takođe moguća za određene vrednosti površinskih parametara. Ovde ćemo ispitati uslove egzistencije površinskih stanja i uticaj graničnih uslova i debljine filma na njihove frekvencije.

Fononski spektari tankih simetričnih filmova određeni su numerički pri različitim vrednostima površinskog parametra $a (= b)$. Iz ovih podataka izdvojene su vrednosti najviših frekvencija u centru Briluenove zone ($k_x = k_y = 0$) i na osnovu toga je formiran dijagram na slici 3.4(a). Sa slike se jasno uočava da, nezavisno od debljine filma, najviša frekvencija spektra preseca gornju granicu balkovskog spektra za $a = 1$. Pri $a > 1$, frekvencija spektra preseca gornju granicu balkovskog spektra. Za ova stanja je karakteristično da su lokalizovana na graničnim površinama filma što se može zaključiti na osnovu slike 3.4(b) na kojoj su prikazane vrednosti spektralnih težina po slojevima filma za različite podzone spektra pri $a = b = 1.25$. Kod najviše podzone, (puna linija na slici) spektralne težine imaju izrazito visoke vrednosti na graničnim površinama. U sredini filma njihove vrednosti su zanemarljivo male. Frekvencije ostalih podzona spektra prisutne su na svim slojevima filma. Njihova distribucija po slojevima filma ima oblik stojećih talasa. Treba svakako napomenuti da se u našem primeru pojavljuju zapravo dva površinska moda veoma bliskih frekvencija. Karakteristično je da se razlika njihovih frekvencija veoma brzo smanjuje sa povećanjem debljine filma. Za $N_z > 20$, dva površinska stanja se praktično spajaju u jedno kao u slučaju polubeskonačnog kristala [59].



Sl.3.4(a) Pojava lokalizovanih fononskih stanja kod filmova različitih debljina.
 (b) Distribucija spektralnih težina po slojevima filma ($N_z = 5$) pri $a = b = 1.25$.

Uslov egzistencije površinskih stanja može se dobiti analitički jedino u slučaju simetričnog filma ($a = b$), kada jednačina (3.32) ima oblik:

$$\sin(N_z + 2)\xi - 2a \sin(N_z + 1)\xi + a^2 \sin N_z \xi = 0 \quad (3.49)$$

Pomoću ove jednačine se mogu ispitati površinska stanja ako se dopusti da je ξ imaginarno: $\xi = i\kappa$, $\kappa > 0$. U tom slučaju je $\rho = 2 \cosh \kappa > 2$, što znači da površinska stanja leže iznad gornje granice balkovskih stanja. Pri velikom N_z iz jednačine (3.49) se dobija:

$$\kappa = \ln a \quad (3.50)$$

što predstavlja uslov egzistencije površinskih stanja. Prema tome, površinska fononska stanja se dobijaju za $a > 1$ što se slaže sa numeričkim rezultatima sa slike 3.4(a).

Na osnovu prethodne analize može se zaključiti da se kod tankih filmova površinska stanja pojavljaju samo ako se vrednost Hukove konstante u površinskim slojevima poveća više od dva puta. Međutim, u takvim uslovima verovatno dolazi do značajne rekonstrukcije površina filma a može se postaviti i pitanje stabilnosti takve strukture. Obim disertacije nije dopustio da ova pitanja budu razmatrana mada bi se na taj način moglo principijelno suditi o validnosti samog modela ⁵.

⁵U literaturi je poznat Debe-Kingov model „cik-cak“ rekonstrukcije površine [60].

3.5 Lokalne gustine stanja i Debajeva frekvencija

Gustina fononskih stanja kod tankih filmova ima lokalni karakter i računa se za svaki sloj prema opštoj teoriji Grinovih funkcija [10] kao:

$$d_{n_z}^{\alpha}(\omega) = \frac{2M}{\hbar} \sum_{k_x, k_y} \operatorname{Re} [G_{n_z, n_z}^{\alpha}(k_x, k_y, \omega + i0^+)] \quad (3.51)$$

$$(\alpha = x, y, z; \quad n_z = 0, 1, \dots, N_z; \quad \nu = 1, 2, \dots, N_z + 1)$$

Kada se iskoristi Dirakova simbolička relacija,

$$\frac{1}{x \pm i0^+} = \mathcal{P} \left\{ \frac{1}{x} \right\} \mp i\pi \delta(x) \quad (3.52)$$

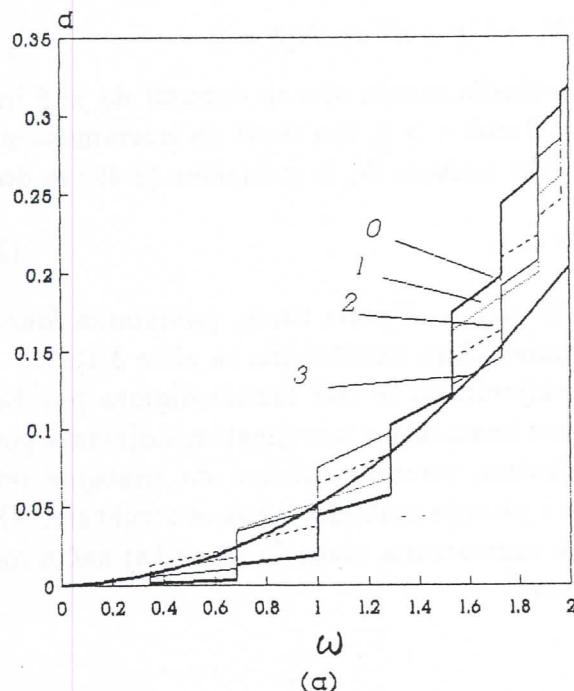
formula (3.51) za prostu kubnu strukturu i u dugotalasnoj aproksimaciji prelazi u:

$$d_{n_z}(\omega) = \frac{N_x N_y}{2\pi \Omega^2} \sum_{\nu=1}^{\nu_{\omega}} g_{n_z, n_z}(\rho_{\nu}) \Theta[\omega - \omega_{\nu}(0, 0)] \omega \quad (3.53)$$

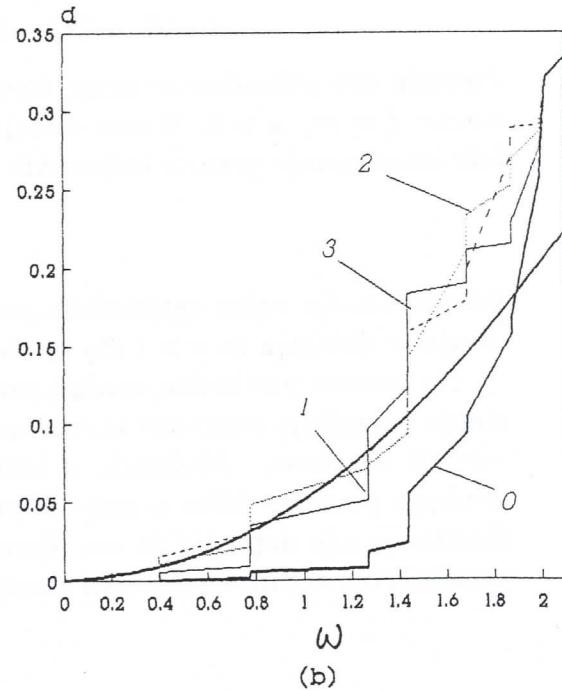
Gornji indeks u sumi označava da se frekvencija kreće u granicama:

$$\omega_{\nu_{\omega}}(0, 0) \leq \omega \leq \omega_{\nu_{\omega}+1}(0, 0) \quad (3.54)$$

Na osnovu formule (3.53) računate su lokalne gustine fononskih stanja za film od osam slojeva ($N_z = 7$) sa idealnim površinama. Rezultati su prikazani na slici 3.5(a). Sa slike se jasno vidi da za razliku od masivnog kristala, lokalne gustine stanja imaju stepenastu strukturu.



(a)



(b)

Sl.3.5 - Lokalne gustine fononskih stanja: (a) $a = b = 0$, (b) $a = b = 1.25$. Pune glatke linije prikazuju balkovsku gustinu stanja.

Prilikom prolaska kroz dno svake podzone gustine stanja trpe nagli skok a unutar podzona linearno rastu sa frekvencijom. Pored toga, u ovom slučaju je na nižim frekvencijama gustina stanja veća u slojevima bližim površini dok na višim frekvencijama gustina stanja postaje veća u dubini filma nego u površinskim slojevima. Analogan račun je urađen i za slučaj $a = b = 1.25$, slika 3.5(b), kada se pored zapreminske pojavljuje i jedno površinsko stanje. Kod unutrašnjih slojeva, gde su prisutna samo zapreminska stanja, gustine stanja se ponašaju kao u prethodnom primeru. Na površinskom sloju, međutim, gustina stanja ima izrazito male vrednosti na niskim frekvencijama dok na visokim frekvencijama veoma brzo raste zbog prisustva lokalizovanog moda.

Debajeva frekvencija za tanke filmove je izračunata iz standardnog uslova [13] da je broj fononskih stanja jednak broju čvorova,

$$N_x N_y (N_z + 1) = \int_0^{\omega_{DF}} d(\omega) d\omega \quad (3.55)$$

Globalna gustina stanja $d(\omega)$ dobija se sumiranjem lokalnih gustina stanja po svim slojevima filma. Pri ovome je korišćeno pravilo suma (3.40). Konačan izraz za $d(\omega)$ je:

$$d(\omega) = \frac{N_x N_y}{2\pi\Omega^2} \sum_{\nu=1}^{\nu_{\omega}} \theta[\omega - \omega_{\nu}(0, 0)] \omega \quad (3.56)$$

Kada se (3.56) uvrsti u (3.55) dobija se sledeći izraz za određivanje Debajeve frekvencije,

$$\omega_{DF} = \Omega_0 \sqrt{4\pi + \frac{1}{N_z + 1} \sum_{\nu=1}^{N_z+1} \Delta_{\nu}} \quad (3.57)$$

gde je $\Omega_0 = (C/M)^{1/2}$. Za slučaj filma sa idealnim granicama ($a = b = 0$), u dugotalasnoj aproksimaciji, kada je:

$$\Delta_{\nu} \approx \frac{\pi \nu}{N_z + 2}, \quad (3.58)$$

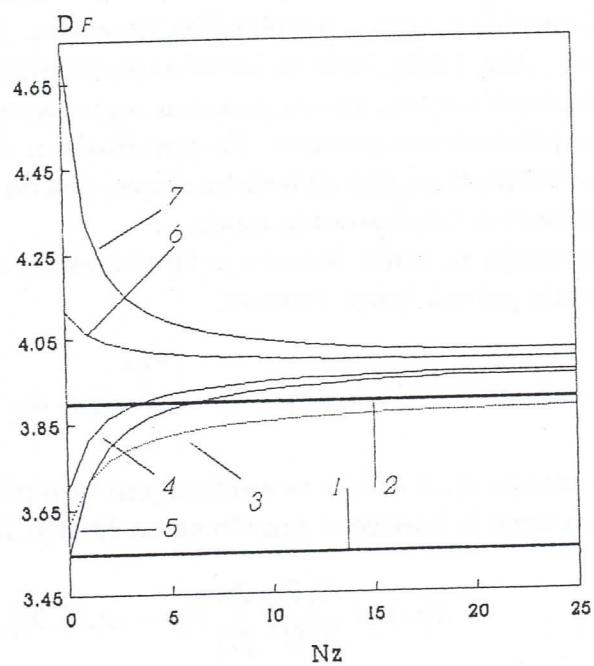
dobija se kubna jednačina,

$$D_F^3 - \frac{3\pi}{4(N_z + 2)} D_F^2 - \frac{\pi^2}{4(N_z + 2)^2} D_F - 6\pi^2 \frac{N_z + 1}{N_z + 2} = 0 \quad (3.59)$$

gde je $D_F = \omega_{DF}/\Omega_0$ bezdimenzionala Debajeva „frekvencija“ za film. Interesantno je uočiti da se pri $N_z \rightarrow \infty$ iz jednačine (3.59) dobija debajevska frekvencija za masivnu strukturu. Proračun debajevskih frekvencija za ostale granične uslove može se izvršiti pomoću (3.57), pri čemu je u dugotalasnoj aproksimaciji,

$$\sqrt{\Delta_{\nu}} \approx 2 \arcsin \left(\frac{1}{2} \sqrt{2 + \rho_{\nu}} \right) \quad (3.60)$$

Na slici 3.6 predstavljene su debajevske frekvencije u funkciji debljine filma za različite granične uslove koji su naznačeni na slici.



Sl.3.6 Debajeva frekvencija za različite modele graničnih uslova: (1) 2D struktura, (2) 3D struktura, (3) $a = b = 0$, (4) $a = b = -1$, (5) $a = 0, b = -1$, (6) $a = 0, b = 1$, (7) $a = b = 1$.

Sa slike se može zaključiti da se promenom graničnih uslova i debljine filma može direktno regulisati vrednost Debajevskih frekvencija. Visoke vrednosti debajevskih frekvencija mogu se postići kod tankih filmova povećanjem površinskih parametara. To se praktično može ostvariti promenom pritiska na graničnim površinama filma.

3.6 Dinamička svojstva atoma u tankim filmovima

3.6.1 Srednji kvadrati pomeraja

Da bi se izračunali srednji kvadrati pomeraja atoma na svakom sloju filma,

$$\langle u_{\alpha;n_z}^2 \rangle = \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x, k_y} \int d\omega \langle u_{\alpha;n_z}^2(k_x, k_y) \rangle_\omega \quad (3.61)$$

$$(n_z = 0, 1, \dots, N_z)$$

potrebno je najpre odrediti Furije lik korelace funkcije:

$$\langle u_{\alpha;n_z}^2(k_x, k_y) \rangle_\omega = \frac{2 \operatorname{Re} G_{n_z, n_z}^{(\alpha)}(k_x, k_y; \omega + i0^+)}{e^{\beta \hbar \omega} - 1}$$

Koristeći izraz (3.37) za Grinovu funkciju, Furije lik korelace funkcije može se napisati u obliku,

$$\langle u_{\alpha;n_z}^2(k_x, k_y) \rangle_\omega = \frac{\hbar}{2M} \sum_{\nu=1}^{N_z+1} \frac{g_{n_z, n_z}^{(\alpha)}(\rho_\nu^\alpha)}{\omega_\nu^\alpha(k_x, k_y)} \frac{\delta[\omega - \omega_\nu^\alpha(k_x, k_y)] - \delta[\omega + \omega_\nu^\alpha(k_x, k_y)]}{e^{\beta \hbar \omega} - 1} \quad (3.62)$$

Zamenom ovog izraza u jednačinu (3.61), nakon standardnog prelaska sa sume po k_x i k_y na integral po ω pomoću gustine fononskih stanja (3.53), dobija se:

$$\langle u_{\alpha;n_z}^2 \rangle = \frac{\theta}{2\pi C^\alpha} \sum_{\nu=1}^{N_z+1} g_{n_z, n_z}^{(\alpha)}(\rho_\nu^\alpha) \mathcal{J}_{\alpha;\nu}^{(u^2)}(\theta) \quad (3.63)$$

gde je:

$$\mathcal{J}_{\alpha;\nu}^{(u^2)} = \int_{x_{1,\nu}^\alpha}^{x_{2,\nu}^\alpha} \coth x \, dx, \quad x_{1,\nu}^\alpha = \frac{\sqrt{\Delta_\nu^\alpha}}{2t}, \quad x_{2,\nu}^\alpha = \frac{\omega_{DF}^\alpha}{2t\Omega_0^\alpha}. \quad (3.64)$$

Radi poređenja sa masivnom strukturu, ovde je uvedena bezdimenzionala „temperatura” u obliku $t = \theta/\theta_0$, gde je $\theta_0 = \hbar\Omega_0$. Razvojem podintegralne funkcije $\coth x$ u red,

$$\coth x = 1 + 2 \sum_{j=1}^{\infty} e^{-2jx}$$

integral (3.64) postaje:

$$\mathcal{J}_{\alpha;\nu}^{(u^2)}(t) = x_{2,\nu}^\alpha - x_{1,\nu}^\alpha - \mathcal{Z}_1(2x_{2,\nu}^\alpha) + \mathcal{Z}_1(2x_{1,\nu}^\alpha) \quad (3.65)$$

gde su $\mathcal{Z}_r(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-nx}}{n^r}$, ($r = 1, 2, \dots$) Dajsonove \mathcal{Z} -funkcije.

Zamenom dobijene vrednosti integrala (3.65) u (3.63) dobijamo srednji kvadrat amplitute pomeraja atoma (u jedinicama $[\theta_0/C]$),

$$\langle u_{\alpha;n_z}^2 \rangle = \frac{1}{4\pi} \sum_{\nu=1}^{N_z+1} g_{n_z, n_z}^{(\alpha)}(\rho_\nu^\alpha) \left\{ D_F^\alpha - \sqrt{\Delta_\nu^\alpha} - 2t \left[\mathcal{Z}_1(D_F^\alpha/t) - \mathcal{Z}_1(\sqrt{\Delta_\nu^\alpha}/t) \right] \right\} \quad (3.66)$$

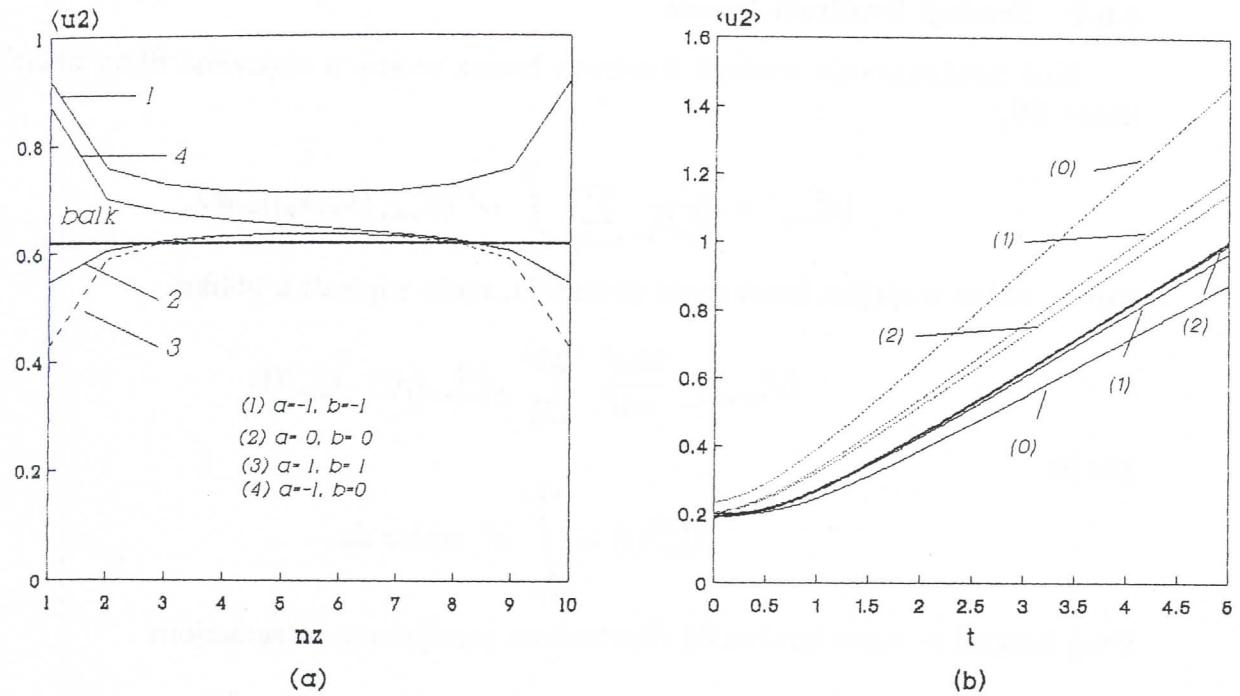
Pomoću ovog izraza izvršena je detaljna numerička analiza srednjih kvadrata pomeraja atoma za različite modele graničnih uslova (3.5–3.7). Kao primer je uzet film od deset ($N_z = 9$) slojeva mada je moguće raditi i sa debljim filmovima ako je raspoloživa memorija računara veća. (Veća memorija je potrebna za izračunavanja spektralnih težina pri većim debljinama filma i proizvoljnim graničnim uslovima). Dobijeni rezultati su prikazani u tabeli 3.1 i na slici 3.7(a).

Tabela 3.1 Komponente srednjeg kvadrata pomeraja na temperaturi $t = 1$.

n_z	$a = b = 0$	$a = b = -1$	$a = 0, b = -1$	$a = b = 1$
0	0.247	0.370	0.246	0.203
1	0.267	0.312	0.266	0.263
2	0.273	0.303	0.273	0.273
3	0.276	0.299	0.277	0.277
4	0.277	0.298	0.280	0.278
5	0.277	0.298	0.283	0.278
6	0.276	0.299	0.286	0.277
7	0.273	0.303	0.291	0.273
8	0.267	0.312	0.302	0.263
9	0.247	0.370	0.362	0.203

U sva tri modela graničnih uslova srednji kvadrati amplitude oscilovanja atoma na površini i unutrašnjosti filma značajno se razlikuju, što je u skladu sa poznatim rezultatima [39]. Kod filma sa slobodnim površinama te razlike iznose 15 – 30 % u temperaturskom intervalu ($0 – \theta_0$). Balkovske vrednosti se očigledno dostižu oko petog sloja od površine filma. Ovde je posebno interesantan slučaj asimetričnog filma na osnovu koga se može zaključiti da povećanje konstanti elastičnosti na površini filma dovodi do smanjenja srednjeg kvadrata pomeraja, dok njeno smanjenje ima suprotan efekat.

Pomoću formule (3.66) ispitana je i temperaturska zavisnost srednjih kvadrata pomeraja atoma na različitim slojevima filma. Ovi rezultati su prikazani na slici 3.7(b) za nekoliko površinskih slojeva ($n_z = 0, 1, 2$) filma sa slobodnim površinama (tačkaste linije) i filma sa idealnim površinama (tanke linije). Puna linija se odnosi na masivnu strukturu. Temperaturska zavisnost je u oba slučaja linearna na visokim temperaturama slično masivnoj strukturi.



Sl.3.7 (a) Vrednosti $\langle u^2 \rangle$ po slojevima filma ($N_z = 9$) na temperaturi $t = 3$.
 (b) Temperaturska zavisnost srednjih kvadrata pomeraja.

Sa ove slike se vidi da srednji kvadrati pomeraja površinskih atoma u modelu slobođnih površina brže rastu sa porastom temperature nego što je to slučaj sa srednjim kvadratima pomeraja kod masivne strukture. U modelu idealnih površina srednji kvadrati pomeraja površinskih atoma sporije rastu sa temperaturom nego ista veličina za atome u masivnoj strukturi. Treba uočiti da se na apsolutnoj nuli amplitudu oscilovanja neznatno razlikuju od balkovskih vrednosti. Primetna razlika nultih oscilacija postoji jedino kod površinskog sloja filma sa slobodnim površinama.

Dobijeni rezultati su u skladu sa najnovijim merenjima srednjeg kvadrata pomeraja, odnosno površinske Debajeve temperature, RHEED tehnikom [48]. U ovim eksperimentima, za razliku od LEED, mere se intenziteti difrakcionih maksimuma pri malom upadnom uglu ($1^\circ - 5^\circ$ u odnosu na površinu uzorka) snopa visokoenergetskih elektrona ($10 - 20\text{ keV}$). U merenjima koja su vršena na olovu, dobijena je Debajeva temperatura od $50K$ što je znatno manje od balkovske vrednosti ($88K$) [27]. Ova razlika pokazuje da su amplitude oscilovanja površinskih atoma veće nego u balku pošto je $\langle u^2 \rangle \sim T_D^{-2}$.

3.6.2 Srednji kvadrati brzina

Kod izračunavanja srednjih kvadrata brzina atoma u slojevima filma polazi se od izraza [26]:

$$\langle v_{\alpha;n_z}^2 \rangle = \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x, k_y} \int_{-\infty}^{\infty} \omega^2 \langle u_{\alpha;n_z}^2(k_x, k_y) \rangle_{\omega} d\omega \quad (3.67)$$

koji se, slično srednjim kvadratima pomeraja, može napisati u obliku:

$$\langle v_{\alpha;n_z}^2 \rangle = \frac{2\theta_0 t^3}{\pi M} \sum_{\nu=1}^{N_z+1} g_{n_z, n_z}^{(\alpha)}(\rho_{\nu}^{\alpha}) \mathcal{J}_{\alpha; \nu}^{(v^2)}(t) \quad (3.68)$$

gde je:

$$\mathcal{J}_{\alpha; \nu}^{(v^2)}(t) = \int_{x_{1,\nu}^{\alpha}}^{x_{2,\nu}^{\alpha}} x^2 \coth x dx, \quad (3.69)$$

Ovaj integral se može izračunati višestrukom parcijalnom integracijom

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_{\alpha; \nu}^{(v^2)}(t) &= \frac{1}{3} (x_{2,\nu}^{\alpha} - x_{1,\nu}^{\alpha}) - (x_{2,\nu}^{\alpha})^2 \mathcal{Z}_1(2x_{2,\nu}^{\alpha}) + (x_{1,\nu}^{\alpha})^2 \mathcal{Z}_1(2x_{1,\nu}^{\alpha}) - \\ &- x_{2,\nu}^{\alpha} \mathcal{Z}_2(2x_{2,\nu}^{\alpha}) + x_{1,\nu}^{\alpha} \mathcal{Z}_2(2x_{1,\nu}^{\alpha}) - \frac{1}{2} \mathcal{Z}_3(2x_{2,\nu}^{\alpha}) + \frac{1}{2} \mathcal{Z}_3(2x_{1,\nu}^{\alpha}) \end{aligned} \quad (3.70)$$

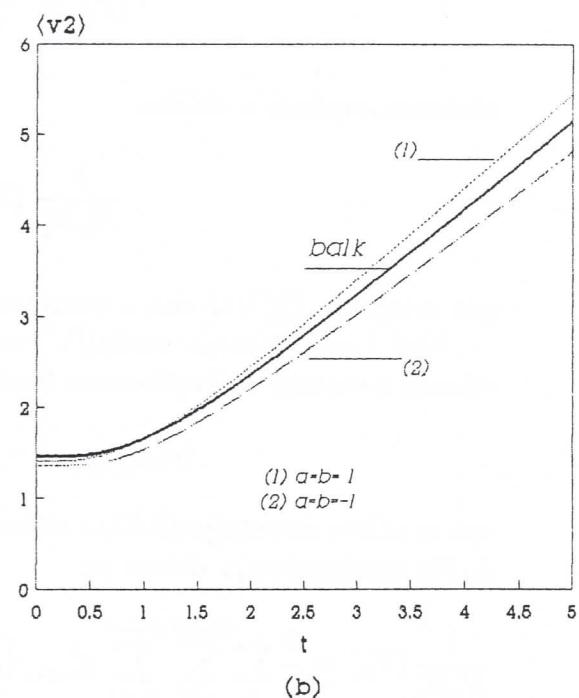
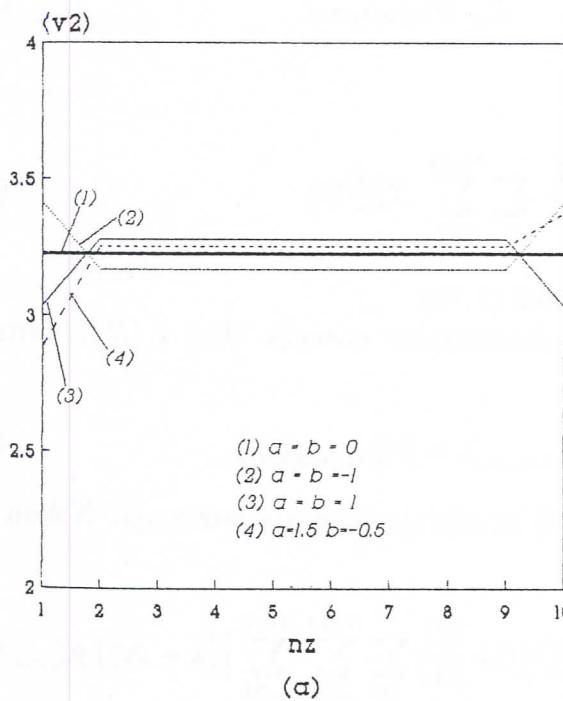
Tako dolazimo do konačnog izraza za srednje kvadrate brzina u jedinicama $[\theta_0/M]$:

$$\begin{aligned} \langle v_{\alpha,n}^2(t) \rangle &= \frac{1}{\pi} \sum_{\nu=1}^{N_z+1} g_{n,n}^{\alpha}(\rho_{\nu}) \left\{ \frac{D_F^3 - (\Delta_{\nu}^{\alpha})^{3/2}}{12} - \frac{t}{2} \left[D_F^2 \mathcal{Z}_1(D_F/t) - \Delta_{\nu}^{\alpha} \mathcal{Z}_1(\sqrt{\Delta_{\nu}^{\alpha}}/t) \right] - \right. \\ &\quad \left. - t^2 \left[D_F \mathcal{Z}_2(D_F/t) - \sqrt{\Delta_{\nu}^{\alpha}} \mathcal{Z}_2(\sqrt{\Delta_{\nu}^{\alpha}}/t) \right] - t^3 \left[\mathcal{Z}_3(D_F/t) - \mathcal{Z}_3(\sqrt{\Delta_{\nu}^{\alpha}}/t) \right] \right\} \end{aligned} \quad (3.71)$$

Pomoću izraza (3.71) izvršene su analize srednjih kvadrata brzina atoma slično slučaju srednjih kvadrata pomeraja. Rezultati za film od deset slojeva prikazani su u tabeli 3.2 i na slici 3.8(a). Srednji kvadrati brzina atoma značajno se razlikuju od balkovskih vrednosti samo za površinske slojeve $n_z = 0$ i $n_z = N_z$. Balkovske vrednosti se dostižu praktično već nakon drugog sloja od površine filma. U modelu idealnih granica, razlike srednjih kvadrata brzina po slojevima filma su zanemarljivo male. Na osnovu rezultata za film sa asimetričnim granicama može se zaključiti da povećanje konstanti elastičnosti na površini filma dovodi do smanjenja srednjeg kvadrata brzina, dok smanjenje vrednosti Hukovih konstanti ima suprotan efekat. Temperaturska zavisnost srednjih kvadrata brzina atoma prikazana je na slici 3.8(b) samo za granični sloj filma sa slobodnim površinama (tačkasta linija) i filma sa graničnim uslovima $a = b = 1$ (isprekidana linija). Puna linija se odnosi na masivnu strukturu. Temperaturska zavisnost je u oba slučaja linear na visokim temperaturama slično masivnoj strukturi. Na absolutnoj nuli, srednji kvadrati brzina nultih oscilacija u oba posmatrana modela graničnih uslova, neznatno su manji od balkovskih vrednosti.

Tabela 3.2: Vrednosti srednjeg kvadrata brzina na temperaturi $t = 1$.

n_z	$a = b = 0$	$a = b = -1$	$a = 0, b = -1$	$a = b = 1$
0	1.596	1.654	1.581	1.533
1	1.593	1.562	1.578	1.625
2	1.593	1.562	1.578	1.625
3	1.593	1.562	1.578	1.625
4	1.593	1.562	1.578	1.625
5	1.593	1.562	1.578	1.625
6	1.593	1.562	1.578	1.625
7	1.593	1.562	1.578	1.625
8	1.593	1.562	1.578	1.625
9	1.596	1.654	1.670	1.533



Sl.3.8 (a) Vrednosti $\langle v_n^2 \rangle$ po slojevima filma na temperaturi $t = 3$,
 (b) temperaturska zavisnost srednjih kvadrata brzina.

3.7 Specifična toplota kristalnih filmova

U prethodnim razmatranjima tankih filmova utvrdili smo uticaj graničnih uslova i debljine filma na fononski spektar, gustinu fononskih stanja, Debajevu frekvenciju i dinamička svojstva atoma. Odgovarajuća poređenja sa masivnim kristalima su ukazala na značajne razlike koje su posledica dimenzione kvantizacije i lokalizovanih fononskih stanja. Na osnovu ovih rezultata može se očekivati da će se i termodinamička svojstva tankih filmova i masivnih struktura takođe razlikovati. Ovde ćemo detaljno analizirati unutrašnju energiju i specifičnu toplotu fononskog podsistema tankih filmova. Druge termodinamičke veličine, kao što su slobodna energija, entropija itd. mogu se dobiti pomoću poznatih relacija [14].

Analogno slučaju masivne strukture (Glava 2) ovde ćemo najpre izračunati unutrašnju energiju polazeći od hamiltonijana (3.8),

$$U = \langle H \rangle = \langle H_B \rangle + \langle H_S \rangle \quad (3.72)$$

pri čemu je prvi član oblika,

$$\langle H_B \rangle = \langle T \rangle + \langle V_B \rangle \quad (3.73)$$

Koristeći relaciju (3.68) za srednje kvadrate brzina kao i pravilo suma (3.40) za Grinove funkcije, srednju vrednost kinetičke energije,

$$\langle T \rangle \equiv \frac{M}{2} \sum_{\alpha, n_x, n_y} \sum_{n_z=0}^{N_z} \langle v_{\alpha; n_x, n_y, n_z}^2 \rangle \quad (3.74)$$

možemo napisati u obliku:

$$\frac{1}{N_x N_y} \langle T \rangle = \frac{\hbar}{4} \sum_{\alpha} \sum_{\mu=1}^{N_z+1} \mathcal{J}_{\alpha, \mu}^{\langle v^2 \rangle}(t) \quad (3.75)$$

gde integrali $\mathcal{J}_{\alpha, \mu}^{\langle v^2 \rangle}(t)$ imaju poznate vrednosti (3.70).

Kod izračunavanja srednjih vrednosti potencijalne energije $\langle V_B \rangle$ i $\langle H_S \rangle$ koriste se relacije simetrije za korelacione funkcije:

$$\langle u_{\alpha; n_x, n_y, n_z}^2 \rangle = \langle u_{\alpha; n_x \pm 1, n_y, n_z}^2 \rangle = \langle u_{\alpha; n_x, n_y \pm 1, n_z}^2 \rangle, \quad (3.76)$$

zatim zakon disperzije (3.41) i relacija (3.63) za srednje kvadrate pomeraja. Nakon nešto dužih izračunavanja dobija se:

$$\begin{aligned} \frac{1}{N_x N_y} \langle V_B \rangle &= \frac{\hbar}{4} \sum_{\alpha} \sum_{\mu=1}^{N_z+1} \sum_{n_z=1}^{N_z-1} g_{n_z, n_z}^{\alpha}(\rho_{\mu}^{\alpha}) \mathcal{J}_{\alpha, \mu}^{\langle v^2 \rangle}(t) + \frac{\hbar C}{8M} \sum_{\alpha} \sum_{\mu=1}^{N_z+1} \sum_{n_z=1}^{N_z-1} \left[(2 - \Delta_{\mu}^{\alpha}) g_{n_z, n_z}^{\alpha}(\rho_{\mu}^{\alpha}) + \right. \\ &\quad \left. + g_{n_z+1, n_z+1}^{\alpha}(\rho_{\mu}^{\alpha}) + g_{n_z-1, n_z-1}^{\alpha}(\rho_{\mu}^{\alpha}) - g_{n_z+1, n_z}^{\alpha}(\rho_{\mu}^{\alpha}) - g_{n_z-1, n_z}^{\alpha}(\rho_{\mu}^{\alpha}) \right] \mathcal{J}_{\alpha, \mu}^{\langle u^2 \rangle}(t) \end{aligned} \quad (3.77)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{N_x N_y} \langle H_S \rangle = & \frac{\hbar}{4} \sum_{\alpha} \sum_{\mu=1}^{N_z+1} \sum_{n_z=1}^{N_z-1} [g_{0,0}^{\alpha}(\rho_{\mu}^{\alpha}) + g_{N_z, N_z}^{\alpha}(\rho_{\mu}^{\alpha})] \mathcal{J}_{\alpha; \nu}^{\langle v^2 \rangle}(t) + \\ & + \frac{\hbar C}{8M} \sum_{\alpha} \sum_{\mu=1}^{N_z+1} \sum_{n_z=1}^{N_z-1} [(3 - \Delta_{\mu}^{\alpha} + 2a\delta_{\alpha, z}) g_{N_z, N_z}^{\alpha}(\rho_{\mu}^{\alpha}) + (3 - \Delta_{\mu}^{\alpha} + 2b\delta_{\alpha, z}) g_{N_z, N_z}^{\alpha}(\rho_{\mu}^{\alpha}) \\ & + g_{1,1}^{\alpha}(\rho_{\mu}^{\alpha}) - 2g_{1,0}^{\alpha}(\rho_{\mu}^{\alpha}) + g_{N_z-1, N_z-1}^{\alpha}(\rho_{\mu}^{\alpha}) - 2g_{N_z-1, N_z}^{\alpha}(\rho_{\mu}^{\alpha})] \mathcal{J}_{\alpha; \mu}^{\langle u^2 \rangle}(t) \end{aligned} \quad (3.78)$$

Sabiranjem jednačina (3.75), (3.77) i (3.78) uz pomoć pravila suma (3.39) i (3.40), za unutrašnju energiju konačno dobijamo:

$$\begin{aligned} \frac{1}{N_x N_y} U(t) = & \frac{\hbar}{2} \sum_{\alpha} \sum_{\mu=1}^{N_z+1} \mathcal{J}_{\alpha; \mu}^{\langle v^2 \rangle}(t) + \\ & + \frac{\hbar C}{8M} \sum_{\alpha} \sum_{\mu=1}^{N_z+1} \left\{ 4 - \Delta_{\mu}^{\alpha} + 2 [ag_{0,0}^{\alpha}(\rho_{\mu}^{\alpha}) + bg_{N_z, N_z}^{\alpha}(\rho_{\mu}^{\alpha})] \right\} \mathcal{J}_{\alpha; \mu}^{\langle u^2 \rangle}(t) \end{aligned} \quad (3.79)$$

Ovaj izraz možemo napisati i u drugačijem - kompaktnijem obliku:

$$\begin{aligned} \frac{1}{N_x N_y} U(t) = & \frac{3\hbar}{2} \sum_{\mu=1}^{N_z+1} \sum_{k_x, k_y} \omega_{\mu}^{\alpha}(k_x, k_y) \coth \left[\frac{\beta\hbar}{2} \omega_{\mu}^{\alpha}(k_x, k_y) \right] + \\ & + \frac{3\hbar}{4} \sum_{\mu=1}^{N_z+1} \sum_{k_x, k_y} [ag_{0,0}^{\alpha}(\rho_{\mu}^{\alpha}) + bg_{N_z, N_z}^{\alpha}(\rho_{\mu}^{\alpha})] \frac{1}{\omega_{\mu}^{\alpha}(k_x, k_y)} \coth \left[\frac{\beta\hbar}{2} \omega_{\mu}^{\alpha}(k_x, k_y) \right] \end{aligned} \quad (3.80)$$

Prvi član navedenog izraza predstavlja unutrašnju energiju idealne strukture, dok drugi član predstavlja popravku koja potiče od prisustva granica. Kao što se vidi, u drugom članu figurišu parametri a i b koji određuju tip graničnih uslova.

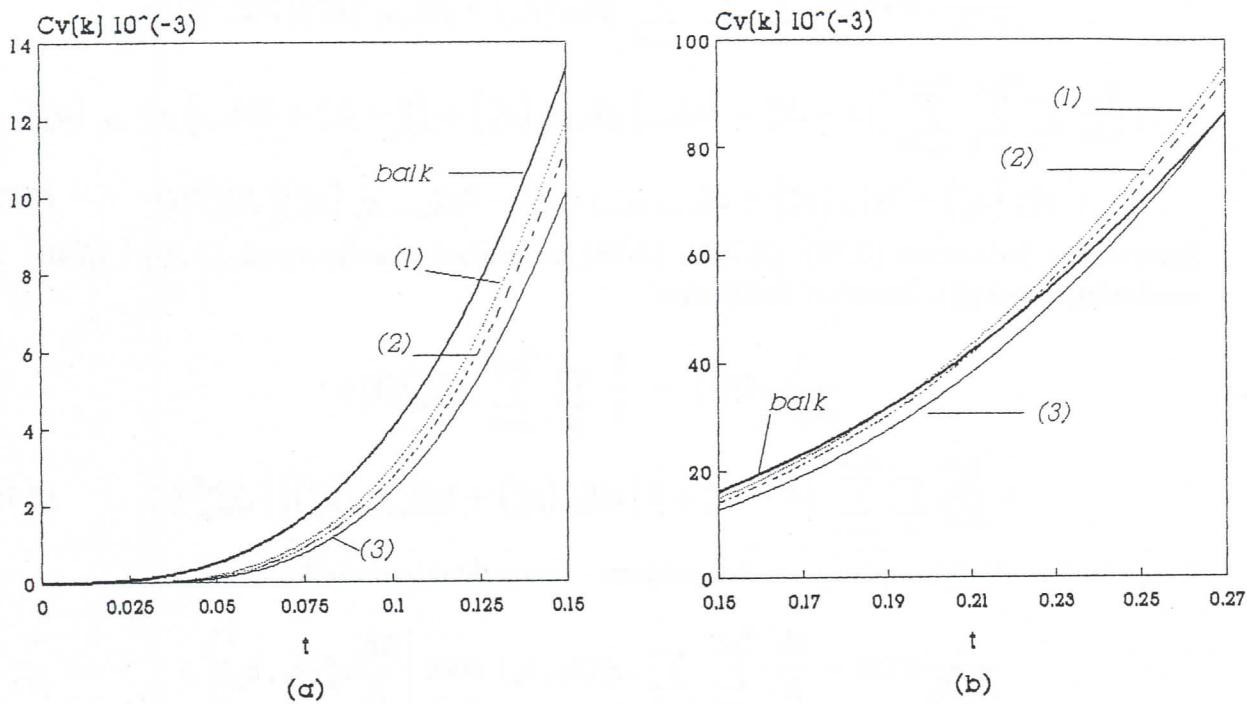
Nakon standardnog prelaska sa sume na integral u formuli (3.80), može se izračunati specifična toplota po elementarnoj celiji,

$$C_V = \frac{1}{N_x N_y (N_z + 1)} \frac{k_B}{\theta_0} \frac{\partial U}{\partial t} \quad (3.81)$$

Na ovaj način se za C_V u jedinicama [k_B] dobija:

$$\begin{aligned} C_V = & \frac{3}{\pi(N_z + 1)} \sum_{\nu=1}^{N_z+1} \left[-\frac{D_F}{4t} \frac{2D_F^2 + ag_{0,0} + bg_{N_z, N_z}}{e^{D_F/t} - 1} + \frac{\sqrt{\Delta_{\nu}}}{4t} \frac{2\Delta_{\nu} + ag_{0,0} + bg_{N_z, N_z}}{e^{\sqrt{\Delta_{\nu}}/t} - 1} - \right. \\ & - \frac{1}{4} (6D_F^2 + ag_{0,0} + bg_{N_z, N_z}) \mathcal{Z}_1(D_F/t) + \frac{1}{4} (6\Delta_{\nu} + ag_{0,0} + bg_{N_z, N_z}) \mathcal{Z}_1(\sqrt{\Delta_{\nu}}/t) - \\ & \left. - 3tD\mathcal{Z}_2(D_F/t) + 3t\sqrt{\Delta_{\nu}}\mathcal{Z}_1(\sqrt{\Delta_{\nu}}/t) - 3t^2\mathcal{Z}_3(D_F/t) + 3t^2\mathcal{Z}_3(\sqrt{\Delta_{\nu}}/t) \right] \end{aligned} \quad (3.82)$$

Prema formuli (3.82) računata je specifična toplota za film od deset slojeva na ekstremno niskim temperaturama, slika 3.9(a) i na nešto višim temperaturama, slika 3.9(b). Može se zaključiti da ponašanje specifične topline osetno zavisi od graničnih uslova. Za slučaj $a = b = 0$, rezultati su kompatibilni sa rezultatima rada [38].



S1.3.9 Specifična toplota kristalne rešetke tankih filmova: (a) niske temperature, (b) srednje temperature. (1) $a = b = -0.5$, (2) $a = b = 0$, (3) $a = b = 1$

Na ekstremno niskim temperaturama specifična toplota filma je manja od specifične toplote masivne strukture⁶, a zatim dolazi do presecanja krivih i na srednjim temperaturama film ima višu vrednost specifične toplote. Grafik nije rađen za ekstremno visoke temperature, ali je lako proceniti da je na ovim temperaturama specifična toplota masivne strukture viša od specifične toplote filma. Tako ostaje zaključak iz [38] da specifične toplote masivne strukture i filma imaju dve presečne tačke.

⁶Model slobodnih površina ($a = b = -1$) dovodi do negativne specifične toplote na ekstremno niskim temperaturama tako da je njegova korektnost diskutabilna. Na slici 3.9(a) uzete su vrednosti parametara ($a = b = -0.5$) i za ove vrednosti specifična toplota je pozitivna. Međutim, dalje smanjivanje površinskih parametara dovodi do ne

4 ELEKTRIČNA SVOJSTVA TANKIH FILMOVA

4.1 Elektroni u tankim filmovima

Elektronski konfajment, dvodimenzionalni (2D) elektronski sistemi i kvantni dimenzioni efekti (QSE - quantum size effects) predmet su intenzivnog razmatranja kako zbog obilja fundamentalnih informacija o elektronskim svojstvima materijala, tako i zbog mogućih tehnoloških implikacija kod savremenih elektronskih i optičkih uređaja [32, 63]. Tokom proteklih godina, veći broj različitih 2D elektronskih sistema je privlačio pažnju: elektroni u slojevima tečnog helijuma [64], elektroni u inverzionim slojevima MOS (metal oxid semiconductor) strukturama kao i kvazidvodimenzionalni gas slobodnih elektrona (2DFEG) koji se formira kod poluprovodničkih heterostruktura i tankih filmova. U poslednjem slučaju postoji više tehnika, pre svega epitaksija molekulskim mlazom (MBE - molecular beam epitaxy) [31] za dobijanje i niže dimenzionih sistema: kvantnih žica - 1D [32] i kvantnih tačaka - 0D [65].

Kod svih navedenih niskodimenzionalnih struktura dolaze do izražaja kvantni dimenzioni efekti ukoliko su njihove karakteristične geometrijske razmere reda veličine de Brojeve talasne dužine nosilaca nanelektrisanja (kod metala $\sim 1\text{nm}$, kod polumetala i poluprovodnika $\sim 10\text{nm}$). Pod QSE, u slučaju 2DFEG, podrazumeva se bilo koja manifestacija kvantovanja normalne komponente kretanja elektrona ili drugih čestica (šupljina, fonona, magnona, eksitona itd.) u tankim filmovima. To se pre svega odnosi na energiju poprečnog kretanja elektrona koja je takođe kvantovana kao posledica elektronskog konfinovanja tj. prostorno ograničenog kretanja elektrona. Pri razmatranju energetske strukture tankih filmova, u najvećem broju starijih radova [66, 67, 68, 69], koristi se najjednostavniji kvadratni izotropni model energetskog spektra. Rešavanjem jednočestične Šredingerove jednačine za prostorno konstantni potencijal i uz uslov da talasna funkcija ili njen izvod isčezava na graničnim površinama filma, pokazano je da se energetske zone cepaju na dvodimenzionale podzone električnog kvantovanja. Pri tome je minimalna energija elektrona u filmu, tzv. „nulta energija” različita od nule. Utvrđeno je da smanjenje debljine filma dovodi do povećanja energija podzona kao i njihovog međusobnog rastojanja. Energetski spektar elektrona i šupljina kod polumetalnih filmova (*Bi, Sb*) ispitivan je u aproksimaciji elipsoidalnog zakona disperzije [70]. Uticaj graničnih uslova na površinama filma, koji se mogu menjati adsorpcijom različitih materijala ili pomoću spoljašnjeg polja, analiziran je u radovima [71, 72, 73, 74]. Pokazano je da se u spektru mogu pojaviti površinske zone i rezonancije zbog kojih se može promeniti znak površinskih termodynamičkih veličina. Na osnovu navedenih radova može se zaključiti ne samo da se elektronski spektari tankih filmova i masivnih kristala kardinalno razlikuju već i da se kod tankih filmova realizuje mogućnost neposrednog uticaja na elektronski spektar, a time i na njihova makroskopska svojstva [57].

Osnovna funkcija za proračun različitih fizičkih veličina, pomoću kojih se opisuju svojstva čvrstih tela, jeste gustina elektronskih stanja [10]. Može se naslutiti da će promene u energetskom spektru tankih filmova, dovesti do značajnih promena u zavisnosti gustine stanja od elektronskih energija. I zaista, dok se kod masivnih kristala radi o monotonoj funkciji, kod tankih filmova, gustina stanja ispoljava singularno ponašanje; ona ima neobičan stepenasti oblik [57]. Kada energija prolazi kroz dno 2D podzone, gustina stanja trpi konačan skok a unutar svake podzone ima konstantnu vrednost [67, 73].

Pored toga, u slučaju filma kada površine igraju važnu ulogu, gustina stanja ima lokalni karakter, tj. zavisi od položaja monoatomskog sloja unutar uzorka. Pri proizvoljnim graničnim uslovima, lokalne gustine stanja se mogu izračunati ne samo za izotropni kvadratni zakon disperzije [75], već i za proizvoljni zonski zakon disperzije. Nagaev [74] je pokazao da napuštanje koncepta kvantnih jama dovodi do kvalitativno novih rezultata za gustinu površinskih stanja kod metalnih filmova. Uračunavanje zonske strukture spektra omogućava da se objasni zavisnost elektronskih karakteristika od kristalografske orijentacije graničnih površina filma. Pored graničnih uslova, gustina elektronskih stanja kod tankih filmova zavisi i od oscilacija kristalne rešetke. Uticaj elektron-fonon interakcije, kako na prostornu raspodelu lokalnih gustina stanja tako i na širenje spektralnih linija, analiziran je [76] u aproksimaciji koherentnog potencijala (CPA - coherent potential approximation). Dobijene su formule za lokalne gustine stanja, širenje spektralnih linija i distribuciju brojeva zaposednuća.

Lokalni karakter gustine elektronskih stanja i njena nemonotona zavisnost od energije dovode do promene osnovnih svojstava tankih filmova u odnosu na masivni kristal istog materijala. Pre svega, proračuni Fermijeve energije [67, 71, 72, 77] pokazali su da položaj Fermijevog nivoa zavisi od debljine filma. Izuzetak su čisti poluprovodnici [67] gde je položaj Fermijevog nivoa stalan za degenerisani gas elektrona i šupljina. Kod metalnih filmova [72], ta zavisnost je monotono rastuća ili opadajuća - zavisno od graničnih uslova. Međutim, kod polumetala [70] i dopiranih poluprovodnika [72] Fermijeva energija predstavlja oscilujuću funkciju debljine filma. Kao što je istaknuto u [70, 57], te oscilacije su povezane sa povećanjem broja 2D podzona ispod Fermijevog nivoa pri povećanju debljine filma. Treba napomenuti da u navedenim radovima nisu jasno navedeni kriterijumi za pojavu ovih oscilacija niti je detaljnije ispitana njihov period. Lutski je uočio [57] da će takvo ponašanje Fermijeve energije dovesti do oscilovanja svih termodinamičkih, kinetičkih i optičkih svojstava tankih filmova čvrstog tela. Tomson i Blat [78, 79] su pokazali da oscilovanje Fermijevog nivoa ima za posledicu oscilatorno ponašanje energetskog gepa kod tankih superprovodnih filmova. Svakako treba spomenuti da su oscilacije kinetičkih koeficijenata prvi put eksperimentalno opažene [80] još 1966. čime je dokazano postojanje kvantnog dimenzionog efekta. Dobijena je oscilatorna zavisnost specifičnog otpora od debljine tankih filmova Bi na niskim temperaturama. Amplituda ovih oscilacija se smanjuje pri povećanju debljine filma i temperature.

S obzirom na sva navedena svojstva tankih filmova kao i na savremene tehnološke mogućnosti njihove izrade, razumljivo je da i danas postoji interesovanje za njihovu elektronsku strukturu. U teorijskim radovima koji su do sada spomenuti kao i radovima [82, 83, 84] sistem elektrona je analiziran pomoću jednočestične talasne funkcije. U ovoj kao i u prethodnoj glavi, za teorijsku analizu se koristi metod Grinovih funkcija. Ovom metodom ćemo reprodukovati neke iz literature poznate rezultate i pružiti teorijsko objašnjenje za oscilovanje termodinamičkih svojstava tankih filmova. U tom cilju, najpre su određene komponente matrice jednoelektronske Grinove funkcije. Pomoću polova Grinove funkcije analiziran je elektronski spektar [85, 86] dok su dijagonalne komponente Grinove funkcije omogućile proračun lokalnih gustina elektronskih stanja i Fermijeve energije. Posebna pažnja posvećena je termodinamici elektrona u tankim filmovima. Određeni su: unutrašnja energija, specifična toplota i distribucija elektrona po slojevima filma [87]. Konačno, razmatraju se oscilatorna svojstva tankih filmova: oscilovanje Fermijevog nivoa, specifične toplotne i energetskog gepa (kod superprovodnih filmova).

4.2 Elektronski hamiltonijan

Elektronski hamiltonijan tankih kristalnih filmovima možemo formirati polazeći od balkovskog hamiltonijana (2.86) koji u aproksimaciji najbližih suseda za prostu kubnu strukturu ima oblik:

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{n_x, n_y, n_z} V_{n_x, n_y, n_z} a_{n_x, n_y, n_z}^+ a_{n_x, n_y, n_z} - \sum_{n_x, n_y, n_z} a_{n_x, n_y, n_z}^+ \times \\
 & \times \left(W_{n_x, n_y, n_z; n_x+1, n_y, n_z} a_{n_x+1, n_y, n_z} + W_{n_x, n_y, n_z; n_x-1, n_y, n_z} a_{n_x-1, n_y, n_z} + \right. \\
 & + W_{n_x, n_y, n_z; n_x, n_y+1, n_z} a_{n_x, n_y+1, n_z} + W_{n_x, n_y, n_z; n_x, n_y-1, n_z} a_{n_x, n_y-1, n_z} + \\
 & \left. + W_{n_x, n_y, n_z; n_x, n_y, n_z+1} a_{n_x, n_y, n_z+1} + W_{n_x, n_y, n_z; n_x, n_y, n_z-1} a_{n_x, n_y, n_z-1} \right) \quad (4.1)
 \end{aligned}$$

Fermionski operatori $a_{\vec{n}}^+$ i $a_{\vec{n}}$, kreiraju i anihiliraju elektrone na čvoru 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 (Glava 3), indeks sloja n_z u (4.1) uzima vrednosti,

$$n_z = 0, 1, 2, \dots, N_z \quad (4.2)$$

gde je $N_z \in [2, 100]$ kod ultratankih filmova. Indeksi n_x i n_y , koji određuju položaj atoma u svakom sloju mogu imati proizvoljne celobrojne vrednosti (od $-\infty$, do $+\infty$). Zbog izmenjenih uslova na granicama filma, promene periodičnog potencijala kristalne rešetke, uzećemo da je energija elektrona V_{n_x, n_y, n_z} oblika:

$$V_{n_x n_y n_z} \Rightarrow V_{n_z} = V(1 + \alpha_0 \delta_{n_z, 0} + \alpha_N \delta_{n_z, N_z}) \quad (4.3)$$

gde je V - energija elektrona na bilo kom čvoru beskonačnog kristala. Površinski parametri α_0 i α_N izražavaju relativnu promenu ove energije na granicama filma. Na isti način možemo izraziti i matrične elemente elektronskog preskoka:

$$\begin{aligned}
 (W_{n_z, n_z} \equiv W_{n_x n_y n_z; n_x \pm 1 n_y n_z} = W_{n_x n_y n_z; n_x n_y \pm 1 n_z}) \\
 W_{n_z, n_z} = W(1 + \beta_0 \delta_{n_z, 0} + \beta_N \delta_{n_z, N_z}) \quad (4.4)
 \end{aligned}$$

$$W_{n_x n_y n_z; n_x n_y n_z+1} \Rightarrow W_{n_z, n_z+1} = W(1 - \delta_{n_z, N_z} + \gamma_0 \delta_{n_z, 0} + \gamma_N \delta_{n_z, N_z-1}) \quad (4.5)$$

$$W_{n_x n_y n_z; n_x n_y n_z-1} \Rightarrow W_{n_z, n_z-1} = W(1 - \delta_{n_z, 0} + \gamma_0 \delta_{n_z, 0} + \gamma_N \delta_{n_z, N_z-1})$$

$$(W_{0, -1} = W_{N_z, N_z+1} = 0)$$

gde je W - konstanta elektronskog transfera idealnog kristala. Površinski parametri β i γ - opisuju relativnu promenu matričnih elemenata W na graničnim površinama filma.

Posebno će biti analizirani tanki simetrični filmovi sa sledećim graničnim uslovima:

- Dirihičevi granični uslovi - talasna funkcija isčezava na granicama filma. U tom slučaju površinski parametri imaju vrednosti:

$$\alpha = \beta = \gamma = 0$$

- Nojmanovi granični uslovi - gradijent talasne funkcije isčezava na granicama filma:

$$\alpha = -1/6, \beta = \gamma = 0$$

Prema našim saznanjima, ovo su jedini modeli graničnih uslova koji dozvoljavaju analitičko određivanje Grinove funkcije. Pored toga, interesantan je i slučaj debelog filma sa asimetričnim graničnim uslovima,

- kvazipolubeskonačan film - kada na jednoj od graničnih površina talasna funkcija isčezava:

$$\alpha_N = \beta_N = \gamma_N = 0$$

dok na drugoj graničnoj površini parametri $(\alpha_0, \beta_0, \gamma_0)$ imaju klizeće vrednosti. Pri velikom broju slojeva takav film prelazi u polubeskonačnu strukturu. Ovaj model graničnih uslova je pogodan za analizu površinskih stanja kristalnih filmova.

Koristeći relacije (4.3 – 4.5), elektronski Hamiltonijan tankih kristalnih filmova možemo napisati u obliku [82]:

$$H = \sum_{n_x, n_y} \sum_{n_z=0}^{N_z} a_{n_x, n_y, n_z}^+ \left[V_{n_z} a_{n_x, n_y, n_z} - W_{n_z, n_z} (a_{n_x+1, n_y, n_z} + a_{n_x-1, n_y, n_z} + a_{n_x, n_y+1, n_z} + a_{n_x, n_y-1, n_z}) - W_{n_z, n_z+1} a_{n_x, n_y, n_z+1} - W_{n_z, n_z-1} a_{n_x, n_y, n_z-1} \right] \quad (4.6)$$

Pomoću tako definisanog hamiltonijana, najpre ćemo izračunati jednočestičnu dvovremensku elektronsku Grinovu funkciju,

$$G_{n_x, n_y, n_z; m_x, m_y, m_z}(t) = \Theta(t) \langle \left[a_{n_x, n_y, n_z}(t), a_{m_x, m_y, m_z}^+(0) \right]_+ \rangle \quad (4.7)$$

standardnom procedurom [2] zasnovanom na jednačinama kretanja. Sličnu proceduru smo primenili u prethodnoj glavi s tom razlikom što se ovde radi o jednačinama hiperboličkog, a ne paraboličkog tipa, što donekle olakšava izračunavanja.

4.3 Proračun elektronskih Grinovih funkcija

Jednačine kretanja elektronske Grinove funkcije se mogu formirati diferenciranjem izraza (4.7) po vremenu:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} G_{n_x, n_y, n_z; m_x, m_y, m_z}(t) &= i\hbar \delta(t) \delta_{n_x, n_y, n_z; m_x, m_y, m_z} + \\ &+ \Theta(t) \langle \left[[a_{n_x, n_y, n_z}(t), H]_-, a_{m_x, m_y, m_z}^+(0) \right]_+ \rangle \end{aligned} \quad (4.8)$$

Zahvaljujući kompaktnom zapisu kvadratnog elektronskog hamiltonijana, nakon izračuvanja komutatora $[a_{n_x, n_y, n_z}(t), H]$ antikomutirajućih operatora, jednačine kretanja se mogu napisati u obliku:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} G_{n_x, n_y, n_z; \vec{m}}(t) &= i\hbar \delta(t) \delta_{n_x, n_y, n_z; \vec{m}} + V_{n_z} G_{n_x, n_y, n_z; \vec{m}}(t) - \\ &- W_{n_z, n_z} [G_{n_x+1, n_y, n_z; \vec{m}}(t) + G_{n_x-1, n_y, n_z; \vec{m}}(t) + G_{n_x, n_y+1, n_z; \vec{m}}(t) + G_{n_x, n_y-1, n_z; \vec{m}}(t)] - \\ &- W_{n_z, n_z+1} G_{n_x, n_y, n_z+1; \vec{m}}(t) - W_{n_z, n_z-1} G_{n_x, n_y, n_z-1; \vec{m}}(t) \end{aligned} \quad (4.9)$$

Dobijeni sistem diferencijalno - diferencnih jednačina se pojednostavljuje primenom vremenskih i parcijalno prostornih Furije transformacija:

$$G_{n_x, n_y, n_z; m_x, m_y, m_z}(t) = \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} \int d\omega e^{i[k_x a_x(n_x - m_x) + k_y a_y(n_y - m_y) - \omega t]} G_{n_z; m_z}(k_x, k_y; \omega) \quad (4.10)$$

Zamenom transformacija (4.10) u (4.9) dobijamo sledeći sistem diferencnih jednačina za Furije lik $G_{n_z; m_z}(k_x, k_y; \omega)$ Grinove funkcije:

$$\begin{aligned} \frac{1}{W} W_{n_z, n_z-1} G_{n_z-1, m_z}(k_x, k_y; E) + \rho_{n_z} G_{n_z, m_z}(k_x, k_y; E) + \\ + \frac{1}{W} W_{n_z+1, n_z+1} G_{n_z+1, m_z}(k_x, k_y; E) = \mathcal{K} \delta_{n_z, m_z} \end{aligned} \quad (4.11)$$

$$(n_z, m_z = 0, 1, \dots, N_z)$$

gde je $\mathcal{K} = i\hbar/(2\pi W)$ i

$$\rho_{n_z} = \frac{1}{W} [E - V_{n_z} + 2W_{n_z, n_z}(\cos a_x k_x + \cos a_y k_y)] \quad (4.12)$$

Sistem jednačina (4.11) možemo zapisati u matričnoj formi:

$$\mathcal{D}_{N_z+1}(\rho) \mathcal{G}_{m_z} = \mathcal{K}_{m_z} \quad (4.13)$$

gde su: \mathcal{G}_{m_z} i \mathcal{K}_{m_z} - matrice kolone:

$$\mathcal{G}_{m_z} \equiv \begin{pmatrix} G_{0; m_z}(k_x, k_y; \omega) \\ G_{1; m_z}(k_x, k_y; \omega) \\ \vdots \\ \vdots \\ G_{N_z; m_z}(k_x, k_y; \omega) \end{pmatrix}; \quad \mathcal{K}_{m_z} \equiv \mathcal{K} \begin{pmatrix} \delta_{0, m_z} \\ \delta_{1, m_z} \\ \vdots \\ \vdots \\ \delta_{N_z, m_z} \end{pmatrix} \quad (4.14)$$

Determinanta sistema jednačina (4.13) predstavlja polinom stepena $N_z + 1$,

$$D_{N_z+1}(\rho) = \begin{vmatrix} \rho + R_0(k_x, k_y) & 1 + \gamma_0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 1 + \gamma_0 & \rho & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \rho & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & \rho & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & \rho \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 + \gamma_N \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \rho + R_N(k_x, k_y) \end{vmatrix} \quad (4.15)$$

i može se izraziti pomoću polinoma \mathcal{C} tipa Čebiševa (Dodatak A1) na sledeći način:

$$D_{N_z+1}(\rho) = (\rho + R_0)(\rho + R_N)\mathcal{C}_{N_z-1} - [(\rho + R_0)(1 + \gamma_N)^2 + (\rho + R_N)(1 + \gamma_0)^2]\mathcal{C}_{N_z-2} + (1 + \gamma_0)^2(1 + \gamma_N)^2\mathcal{C}_{N_z-3} \quad (4.16)$$

U formulama (4.15) i (4.16) upotrebljene su oznake:

$$\rho = \mathcal{E} - \left(\frac{V}{W} - 4 \right) - 8Y(k_x, k_y); \quad Y(k_x, k_y) = \frac{1}{2} \left(\sin^2 \frac{a_x k_x}{2} + \sin^2 \frac{a_y k_y}{2} \right) \in (0, 1) \quad (4.17)$$

$$R = 4\beta[1 - 2Y(k_x, k_y)] - \frac{V}{W}\alpha, \quad \mathcal{E} = \frac{E}{W}$$

Rešavanjem sistema jednačina (4.13) dobijaju se Grinove funkcije $G_{n_z; n_z}(k_x, k_y; \mathcal{E})$ i $G_{n_z; n_z+1}(k_x, k_y; \mathcal{E})$ koje se pojavljuju kod proračuna termodinamičkih svojstava elektronskog gasa u tankim filmovima.

Uvodeći pomoćne polinome:

$$\begin{aligned}
 B_n(\rho) &= \left| \begin{array}{ccccccccc} \rho + R(k_x, k_y) & 1 + \gamma & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 + \gamma & \rho & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \rho & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & \rho & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & \rho & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & \rho \end{array} \right|_n = \\
 &= [\rho + R(k_x, k_y)] C_{n-1}(\rho) - (1 + \gamma)^2 C_{n-2}(\rho)
 \end{aligned} \tag{4.18}$$

potrebne Grinove funkcije se mogu napisati u obliku pravih racionalnih funkcija:

$$\begin{aligned}
 G_{n_z; n_z}(k_x, k_y; \mathcal{E}) &= \mathcal{K} \frac{B_{n_z}(\rho) B_{N_z - n_z}(\rho)}{D_{N_z + 1}(\rho)} \\
 G_{n_z; n_z + 1}(k_x, k_y; \mathcal{E}) &= -\mathcal{K} \frac{B_{n_z}(\rho) B_{N_z - n_z - 1}(\rho)}{D_{N_z + 1}(\rho)}
 \end{aligned} \tag{4.19}$$

Polovi Grinovih funkcija (4.19) predstavljaju realne i jednostrukе korene polinoma,

$$D_{N_z + 1}(\rho) = 0 \implies \{ \rho_\nu, \nu = 1, 2, 3, \dots, N_z + 1 \} \tag{4.20}$$

koji se mogu odrediti numerički za proizvoljne vrednosti parametara α , β i γ ili analitički u slučaju Nojmanovih i Dirihelevih graničnih uslova. Pomoću korena ρ_ν iz (4.20) Grinove funkcije (4.19) se faktorizuju na parcijalne razlomke:

$$G_{n_z; m_z}(k_x, k_y; \mathcal{E}) = \mathcal{K} \sum_{\nu=1}^{N_z+1} \frac{g_{n_z; m_z}(\rho_\nu)}{\rho - \rho_\nu}, \quad (m_z = n_z, n_z + 1) \tag{4.21}$$

Spektralne težine $g_{n_z; m_z}(\rho_\nu)$ Grinovih funkcija [15] određeni su izrazima:

$$g_{n_z; n_z}(\rho_\nu) = B_{n_z}(\rho) B_{N_z - n_z}(\rho) \left\{ \frac{d}{d\rho} D_{N_z + 1}(\rho) \Big|_{\rho=\rho_\nu} \right\}^{-1} \tag{4.22}$$

$$g_{n_z; n_z + 1}(\rho_\nu) = -B_{n_z}(\rho) B_{N_z - n_z - 1}(\rho) \left\{ \frac{d}{d\rho} D_{N_z + 1}(\rho) \Big|_{\rho=\rho_\nu} \right\}^{-1}$$

Koristeći relaciju (4.12) konačno možemo pisati:

$$G_{n_z; m_z}(k_x, k_y; \mathcal{E}) = \frac{i\hbar}{2\pi W} \sum_{\nu=1}^{N_z+1} \frac{g_{n_z; m_z}(\rho_\nu)}{\mathcal{E} - \mathcal{E}_\nu(k_x, k_y)} \quad (4.23)$$

Relacije (4.15) i (4.22) potpuno određuju komponente matrice jednočestične elektronske Grinove funkcije (4.23).

Determinanta (4.15) određuje elektronski zakon disperzije:

$$\mathcal{E}_\nu(k_x, k_y) = \Delta_\nu(k_x, k_y) + 8 Y(k_x, k_y), \quad \Delta_\nu(k_x, k_y) = \left(\frac{V}{W} - 4 \right) + \rho_\nu(k_x, k_y) \quad (4.24)$$

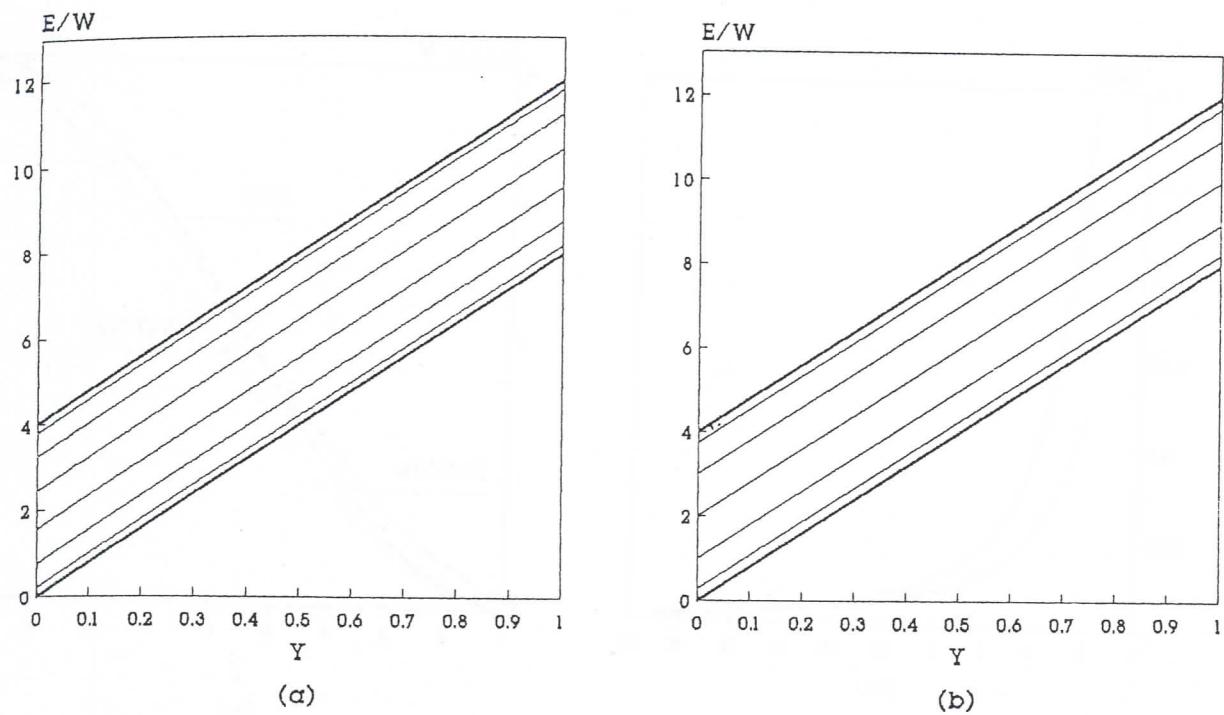
pomoću koga ćemo analizirati elektronske spekture.

4.4 Elektronski spektri tankih filmova

Pomoću zakona disperzije (4.24) sada ćemo detaljno ispitati elektronske spekture tankih filmova. Cilj ovih analiza je da se ispitaju uticaji konačnih dimenzija filma i graničnih uslova na energetski spektar. Kod tankih filmova se pored zapreminske mogu pojaviti i površinska - Tamovska stanja koja ćemo takođe analizirati i utvrditi kriterijume za njihovu egzistenciju. Posebna pažnja biće posvećena energetskom gepu koji je veoma izražen kod ultratankih filmova. Stalno poredeći elektronske spekture tankih filmova i masivnih struktura, videćemo da se mogu izvesti zaključci koji su važni kako sa fundamentalno - fizičkog, tako i sa praktičnog stanovišta.

4.4.1 Zakon disperzije i zapreminska stanja

Osnovna karakteristika energetskih spektara elektrona u tankim filmovima jeste kvazidiskretnost. Zbog prostorne ograničenosti poprečnog kretanja elektrona - elektronskog konfajmenta, komponenta kvaziimpulsa k_z i odgovarajuća energija su kvantovane tj. mogu imati samo određene vrednosti čiji je broj jednak broju slojeva filma. Posto komponente kvaziimpulsa k_x i k_y imaju proizvoljne vrednosti, elektronski spektar tankih filmova se raspada na dvodimenzione podzone električnog kvantovanja. Na slici 4.1 prikazane su dozvoljene vrednosti elektronskih energija u funkciji parametra $Y(k_x, k_y) = [\sin^2(ak_x/2) + \sin^2(ak_y/2)]/2$ kod šestoslojnog filma ($N_z = 5$, radi preglednosti) za različite vrednosti površinskih parametara. Balkovske granice spektra ($\rho = \pm 2$) elektronskog gasa ($V = 6W$) prikazane su debelim linijama. Na slici se jasno uočava kvazidiskretnost spektra kao i činjenica da je pri Dirihelevim graničnim uslovima, minimalna energija elektrona u tankom filmu različita od nule. Ova tzv. „nulta“ energija ili energetski gep, zavisi od debljine filma i graničnih uslova što je prikazano na slici 4.2(a). Jedino pri Nojmanovim graničnim uslovima energetski gep ne postoji, najniža energetska podzona se podudara sa donjom granicom balkovskog spektra.



Sl.4.1 Elektronski spektar za $N_z = 5$ i a) Dirihirove b) Nojmanove granične uslove.

Prisustvo gepa je posebno izraženo kod tankih filmova ($N_z < 10$) a povećanje broja slojeva dovodi do njegovog isčezavanja, slika 4.2(a). Sa slike se može zaključiti da je uticaj površinskih parametara, pojedinačno uvez, približno isti [88, 89]. Postojanje energetskog gepa potvrdila su ispitivanja optičkih svojstava tankih filmova Bi , $InSb$ i nekih drugih uskozonskih poluprovodnika [57]. U ovim eksperimentima je uočen pomak crvene granice fotoapsorpcije pri izmeni debljine filma.

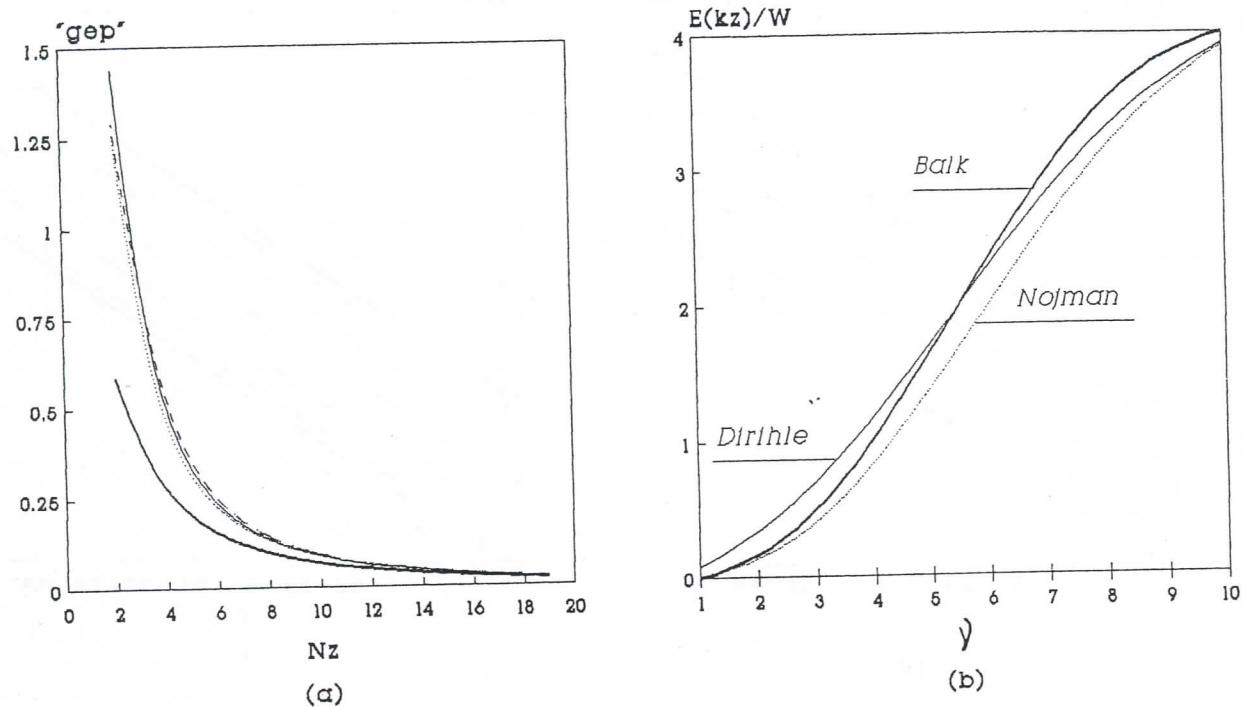
Minimalne vrednosti energija (Δ_ν) dimenzionih podzona takođe zavise od debljine filma i graničnih uslova. Smanjenje debljine filma dovodi do povećavaju energija podzona kao i rastojanja između njih. U slučaju Dirihirovih graničnih uslova, vrednosti minimalnih energija podzona iznose:

$$\Delta_\nu = 4 \sin^2 \left[\frac{\pi \nu}{2(N_z + 2)} \right] ; \quad \nu = 1, 2, \dots, N_z + 1, \quad (4.25)$$

dok je pri Nojmanovim graničnim uslovima:

$$\Delta_\nu = 4 \sin^2 \left[\frac{\pi (\nu - 1)}{2(N_z + 1)} \right] , \quad \nu = 1, 2, \dots, N_z + 1 \quad (4.26)$$

Dva poslednja izraza određuju zapravo zavisnost energije elektrona od dozvoljenih vrednosti kvaziimpulsa poprečnog kretanja k_z pri $k_x = k_y = 0$. Ova zavisnost je prikazana na slici 4.2(b) za film od deset slojeva ($N_z = 9$).



S1.4.2(a) Energetski gep v.s. debljina filma za različite granične uslove: debela linija - $\alpha = \beta = \gamma = 0$, tanka linija - $\alpha = 0.5, \beta = \gamma = 0$, tačkasta linija - $\alpha = \beta = 0, \gamma = -0.5$, isprekidana linija - $\alpha = \gamma = 0, \beta = -0.5$. (b) Elektronski zakon disperzije $E(k_z) \equiv E_\nu(0,0)$.

Pomoću spektralnih težina (4.22), koje predstavljaju kvadrate talasnih funkcija [5], može se zaključiti da su pri Dirihielovim i Nojmanovim graničnim uslovima u spektru prisutna samo zapreminska elektronska stanja. Naime, pri Nojmanovih graničnim uslovima spektralne težine su oblika:

$$g_{n_z, n_z}(\rho_\nu) = \begin{cases} \frac{1}{N_z + 1}, & \nu = 1 \quad (\rho = -2) \\ \frac{2}{N_z + 1} \sin^2 \left[(n_z + \frac{1}{2}) \frac{\pi(\nu - 1)}{N_z + 1} \right], & \nu = 2, 3, \dots, N_z + 1 \end{cases} \quad (4.27)$$

dok su pri Dirihielovim graničnim uslovima:

$$g_{n_z, n_z}(\rho_\nu) = \frac{2}{N_z + 1} \sin^2 \left[(n_z + 1) \frac{\pi \nu}{N_z + 2} \right], \quad \nu = 1, 2, \dots, N_z + 1 \quad (4.28)$$

Iz ovih izraza vidimo da su elektronska stanja distribuirana po slojevima filma u vidu stojećih talasa, što znači da se radi o zapreminskim (kolektivnim) stanjima koja su prisutna na svim slojevima. Promena graničnih uslova može dovesti do pojave lokalizovanih stanja kod kojih spektralne težine imaju oštar maksimum na određenom sloju, a sa udaljavanjem od njega brzo opadaju.

4.4.2 Površinska elektronska stanja

Egzistenciju površinskih stanja prvi je demonstrirao Tam 1932. Na primeru polubeskonačnog kristala, Tam je pokazao da prisustvo površine može dovesti do pojave diskretnih energetskih nivoa koji leže izvan kontinualne zone dozvoljenih energija masivnog kristala. Ovim nivoima energije odgovaraju kompleksne vrednosti kvaziimpulsa, tako da su odgovarajuće talasne funkcije monotono (ili oscilatorno) prigušene unutar kristala. To znači da su elektroni sa ovim vrednostima energije lokalizovani u blizini površine kristala. Zbog toga se diskretni energetski nivoi, koji leže izvan balkovskih granica, nazivaju površinskim nivoima.

U slučaju tankih filmova, koji su ograničeni sa dve površine, lokalizovana stanja su takođe moguća za određene vrednosti površinskih parametara. Pre nego što predemo na analizu uslova egzistencije površinskih stanja kristalnih filmova, na konkretnom primeru ćemo odrediti energije površinskih stanja i ispitati uticaj debljine filma na njihove vrednosti.

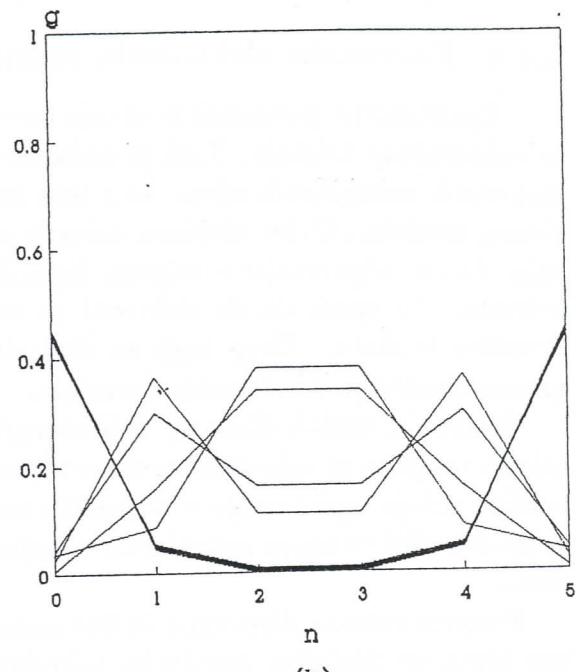
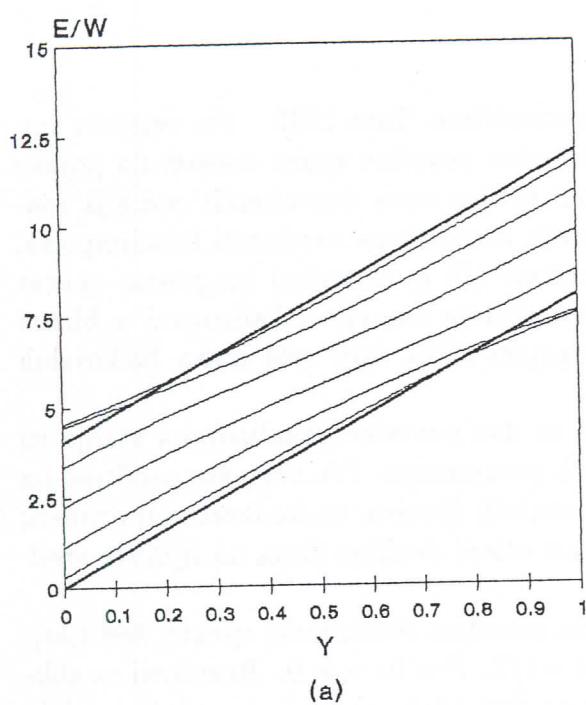
Pomoću zakona disperzije (4.24) numerički su određeni elektronski spektri šestoslojnog filma pri sledećim graničnim uslovima: $\alpha = -1/2$, $\beta = 0$, $\gamma = 0$. Rezultati sa slike 4.3(a) pokazuju da se u ovom primeru dobijaju po dva bliska nivoa koja u jednom delu Briluenove zone leže izvan balkovskih granica. U centru zone oni leže iznad gornje granice a na kraju zone ispod donje granice balkovskih stanja zbog čega se nekada nazivaju [59]: P - stanja i N - stanja, respektivno.

Da se zaista radi o stanjima koja su lokalizovana na graničnim površinama filma vidimo sa slike 4.3(b) na kojoj su prikazane spektralne težine računate u centru Briluenove zone. Tanke linije se odnose na zapreminska stanja a pune linije na lokalizovana P - stanja. U slučaju N - stanja, spektralne težine takođe brzo opadaju ka sredini filma.

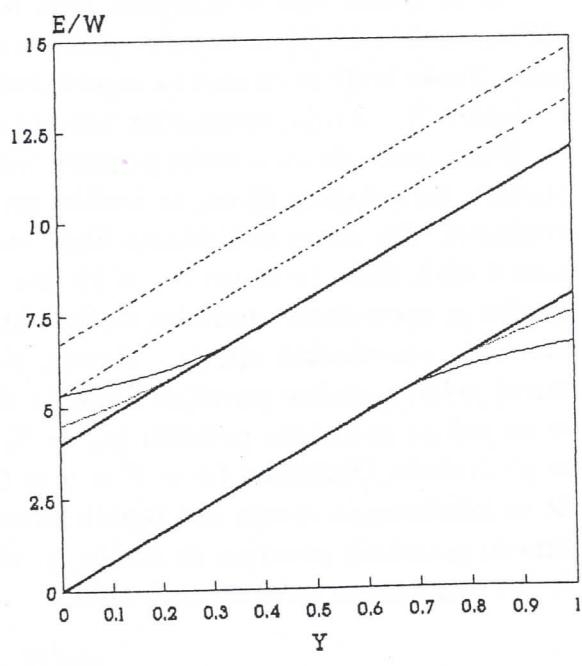
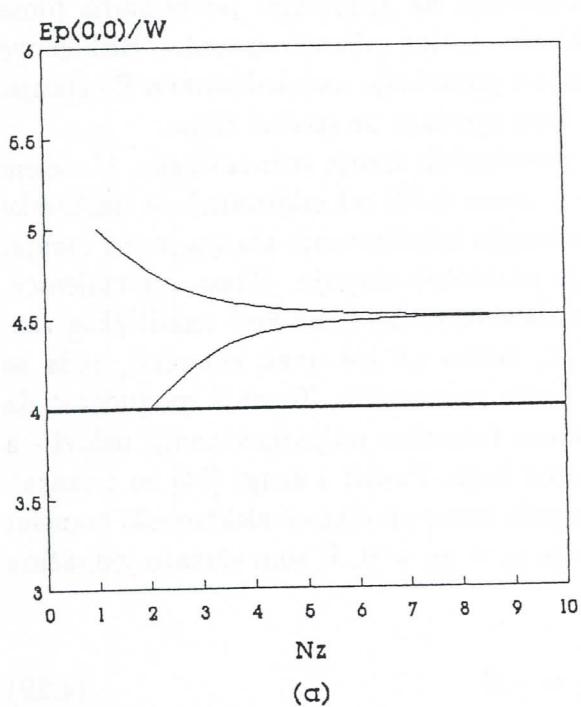
Treba uočiti da su u ovom primeru energije površinskih stanja veoma bliske. U našem primeru šestoslojnog filma, ta razlika pri $Y = 1$ iznosi 0.9% od odgovarajuće balkovske vrednosti. Pri većim debljinama filma razlika energija lokalizovanih stanja je još manja, slika 4.4(a), tako da se pri $N_z > 10$ oba rešenja praktično stapaju. Zbog ove činjenice, sasvim je opravdana upotreba modela kvazipolubeskonačnog filma kod analitičkog razmatranja površinskih stanja. Naime, ako je N_z veliko ali još uvek konačno, tada se uticaj jedne granične površine filma na drugu može zanemariti. To daje mogućnost da se na jednoj graničnoj površini ($n_z = N_z$) odaberu formalno najjednostavniji uslovi - a to su svakako Dirlieovi ($\alpha = \beta = \gamma = 0$). Pored toga, Pantić i drugi [84] su pokazali da su lokalizovana stanja kod tankih filmova moguća samo ukoliko se elektronski transfer između graničnih površina ne menja, tj. ukoliko je $\gamma_0 = \gamma_N = 0$. U tom slučaju jednačina (4.20) ima znatno jednostavniji oblik:

$$\frac{\sin(N_z + 2)\xi}{\sin(N_z + 1)\xi} = -R \quad (4.29)$$

gde je $R = 4\beta [1 - 2Y(k_x, k_y)] - 6\alpha$, bezdimenzionalni parametar površinske perturbacije.



Sl.4.3 (a) Pojava lokalizovanih stanja u spektru pri $N_z = 5$ i $\alpha = -1/2$, $\beta = 0$, $\gamma = 0$.
 (b) Vrednosti spektralnih težina na slojevima filma.



Sl.4.4 (a) Zavisnost energija površinskih P - stanja od debljine filma. (b) Energije povrsinskih stanja za različite vrednosti površinskih parametara: tačkasta linija - $\beta = 0.5$, tanka linija - $\beta = 0.75$, isprekidane linije - $\alpha = 0.5$ (donja) i $\alpha = 0.75$ (gornja).

Pomoću jednačine (4.29), površinska stanja se mogu ispitati analitički ako se dopusti da je ξ kompleksno, $\xi = \zeta + i\kappa$, pri čemu je κ realno i pozitivno. Međutim, kako $\rho = 2 \cos \xi$ mora uvek biti realno,

$$\rho = 2(\cos \zeta \cosh \kappa - i \sin \zeta \sinh \kappa)$$

to imaginarni deo poslednjeg izraza mora biti jednak nuli, što znači da je $\zeta = \{0, \pi\}$. Prema tome, za vrednosti:

$$\xi = i\kappa, \quad \xi = \pi + i\kappa \quad (4.30)$$

dobijaju se dva površinska stanja.

- Kada je $\xi = i\kappa$ tada je $\rho = 2 \cosh \kappa > 2$ što znači da se radi o P - stanjima čija energija leži iznad gornje granice balkovskih stanja. Za $\xi = i\kappa$ i $N_z \rightarrow \infty$ jednačina (4.29) se svodi na:

$$e^\kappa = -R$$

koja za $\kappa > 0$ daje:

$$R < -1 \quad (4.31)$$

što predstavlja uslov egzistencije P - stanja.

- Kada je $\xi = \pi + i\kappa$, dobijaju se N - stanja koja leže ispod donje granice balkovskih stanja ($\rho < -2$). U ovom slučaju jednačina (4.29) ima oblik:

$$e^\kappa = R$$

tako da je:

$$R > 1 \quad (4.32)$$

uslov egzistencije N - stanja.

Sumirajući prethodnu analizu možemo reći da pri $R = 0$ film ima $N_z + 1$ zapreminske stanja koja leže u intervalu $-2 < \rho < 2$. Kada se R smanjuje ispod nule, energija svih podzona se povećava sve dok se pri $R = -1$ ne pojavi površinsko P - stanje u centru Briluenove zone. Pri $4\beta + 6\alpha > 1$ dolazi do potpunog odvajanja ovih stanja od balkovske zone. Nasuprot tome, ako se R povećava iznad nule, energije podzona se smanjuju sve dok se pri $R = 1$ ne pojavi površinsko N - stanje na kraju Briluenove zone. Ova površinska stanja se potpuno odvajaju od balkovske zone pri $4\beta - 6\alpha > 1$.

Navedene procene se dobro slažu sa rezultatima numeričke analize površinskih stanja koji su prikazani na slici 4.4(b). Energije površinskih stanja su računate za film od deset slojeva ($N_z = 9$) pri različitim vrednostima parametara α i β .

4.5 Lokalne gustine stanja i Fermijeva energija

Velika prednost metoda Grinovih funkcija ogleda se u tome što omogućava direktni proračun gustine stanja. Gustina elektronskih stanja ima lokalni karakter [76] i računa se za svaki sloj prema formuli:

$$d_{n_z}(\mathcal{E}) = \frac{2W}{\hbar} \sum_{k_x, k_y} \operatorname{Re} G_{n_z, n_z}(k_x, k_y; \mathcal{E} + i0^+) \quad (4.33)$$

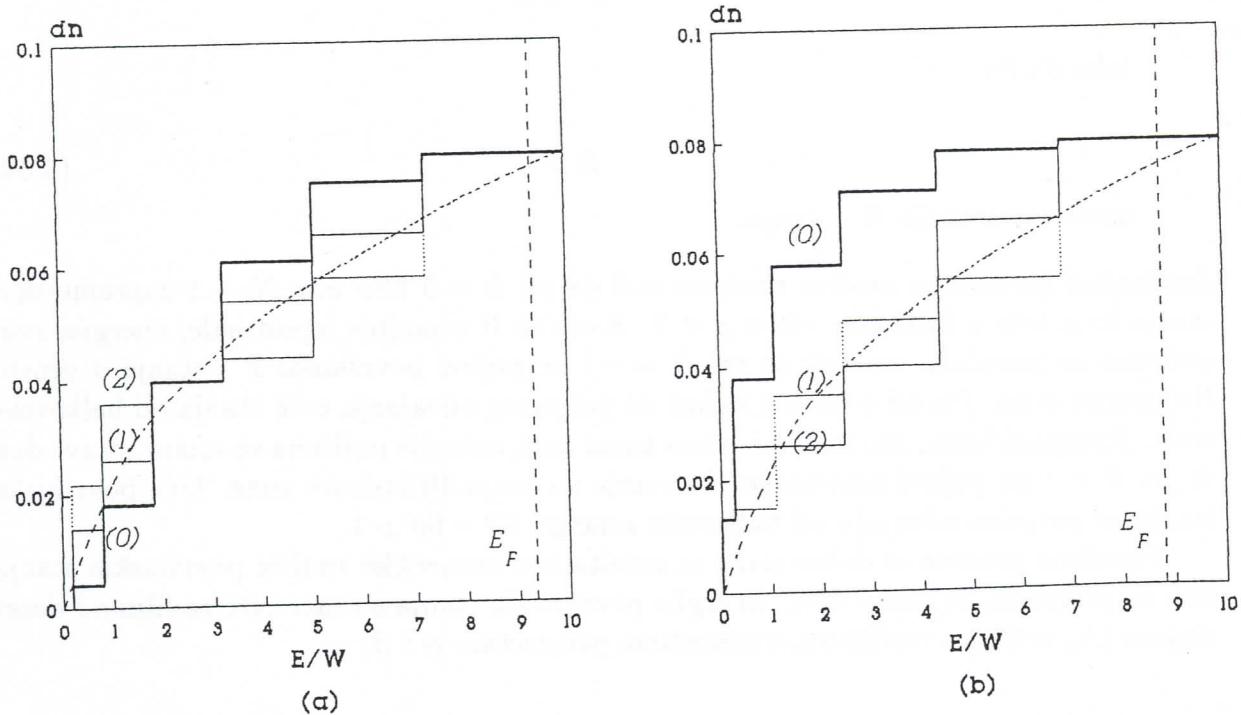
Kada se na osnovu (4.23) nađe realni deo Grinove funkcije, formula (4.33) prelazi u

$$d_{n_z}(\mathcal{E}) = \frac{N_x N_y}{4\pi W} \sum_{\nu=1}^{\nu_E} g_{n_z, n_z}(\rho_\nu) \Theta(\mathcal{E} - \Delta_\nu) \quad (4.34)$$

$$\Delta_{\nu_E} < \mathcal{E} < \Delta_{\nu_E+1}$$

Spektralne težine g_{n_z, n_z} u opštem slučaju zavise od k_x i k_y i tada je proračun veličine d_n veoma komplikovan. Da bismo dobili koliko - toliko realnu predstavu o ponašanju lokalnih gustina, koristićemo samo Nojmanove i Dirihićeve granične uslove. Ako važe Nojmanovi granični uslovi, lokalne gustine stanja imaju izgled dat na slici 4.5(a). Za slučaj da važe Dirihićevi granični uslovi, grafik lokalnih gustina stanja dat je na slici 4.5(b).

Kada važe Nojmanovi uslovi, gustina stanja na svim energijama je najveća u graničnim slojevima i opada u dubini filma. U slučaju Dirihićevih graničnih uslova, gustina stanja na niskim energijama je najmanja u graničnim slojevima i raste u dubinu filma dok je na višim energijama situacija obrnuta.



Sl.4.5 Lokalne gustine stanja pri (a) Dirihićevim (b) Nojmanovim graničnim uslovima.

Na osnovu gornjeg grafika može se zaključiti da gustina stanja stepenasto zavisi od energije pobuđenja i da raste sa porastom energije. U svakoj podzoni, gustine stanja ne zavise od energije. Radi poređenja, na slikama 4.5(a) i 4.5(b) dat je grafik gustine stanja za masivnu strukturu. On je predstavljen isprekidanom linijom.

Kao što je poznato, Fermijeva energija se određuje iz uslova održanja broja elektrona:

$$\mathcal{N}_{el} = 2 \sum_{n_z=0}^{N_z} \int_0^{\mathcal{E}_F} d_n(\mathcal{E}) d\mathcal{E} \quad (4.35)$$

Da bi se izračunala Fermijeva energija, koristiće se izrazi za gustine stanja u Nojmanovom i Dirihićevom modelu, kao i pravilo sume za Grinove funkcije koje se svodi na:

$$\sum_{n_z=0}^{N_z} g_{n_z, n_z}(\rho_\nu) = 1 , \quad \forall \nu = 1, 2, \dots, N_z + 1 \quad (4.36)$$

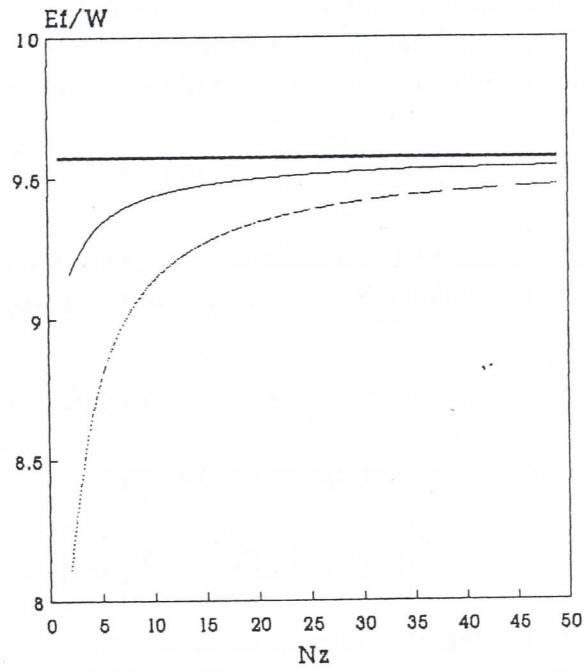
Opisanim postupkom za Fermijevu energiju se dobija izraz:

$$\mathcal{E}_F = \frac{1}{\nu_m} \left[2\pi(N_z + 1) \frac{\mathcal{N}_{el}}{\mathcal{N}_{at}} + \sum_{\nu=1}^{\nu_m} \Delta_\nu \right] \quad (4.37)$$

Kao što se vidi za različite modele dobijaju se različite Fermijeve energije zbog toga što su minimalne energije Δ_ν za pomenute modele različite. Veličina ν_m koja figuriše u (4.37) određuje se iz nejednakosti (videti (4.34)):

$$\Delta_{\nu_m} < \mathcal{E}_F < \Delta_{\nu_m+1} \quad (4.38)$$

Analizirajući dobijene formule možemo zaključiti da kod metala [61] gde je $\mathcal{N}_{el}/\mathcal{N}_{at} \geq 1$ tj. $\nu_m = N_z + 1$, Fermijeva energija raste sa porastom debljine filma i asimptotski se približava balkovskoj vrednosti. Ponašanje Fermijeve energije prikazano je na slici 4.6 za $\mathcal{N}_{el}/\mathcal{N}_{at} = 1$. Sa slike se vidi da je Fermijeva energija kod filma niža od odgovarajuće balkovske vrednosti i da zavisi od graničnih uslova. U slučaju Dirihićevih uslova Fermijeva energija je viša nego u slučaju Nojmanovih uslova. U svakom slučaju, Fermijeva energija metalnih filmova je monotono rastuća funkcija njihove debljine.



Sl.4.6 Zavisnost Fermijeve energije od debljine filma.

4.6 Termodinamička svojstva sistema elektrona

Pomoću elektronske Grinove funkcije sada ćemo izračunati statističku srednju vrednost elektronskog hamiltonijana tj. unutrašnju energiju elektronskog gasa. Na osnovu formula (4.6), (4.34) i (4.36), za unutrašnju energiju $\mathcal{U} = U/W$ dobijamo izraz:

$$\mathcal{U} = \sum_{\nu=1}^{\nu_m} \sum_{k_x k_y} \frac{\mathcal{E}_\nu(k_x, k_y)}{e^{\beta[\mathcal{E}_\nu(k_x, k_y) - \mathcal{E}_F]} + 1} \quad (4.39)$$

Ako se u (4.39) pređe od sume na integral, on se svodi na

$$\mathcal{U} = \frac{N_x N_y}{4\pi} \sum_{\nu=1}^{\nu_m} \int_{\Delta_\nu}^{\infty} \frac{\mathcal{E} d\mathcal{E}}{e^{(\mathcal{E} - \mathcal{E}_F)/t} + 1} \quad (4.40)$$

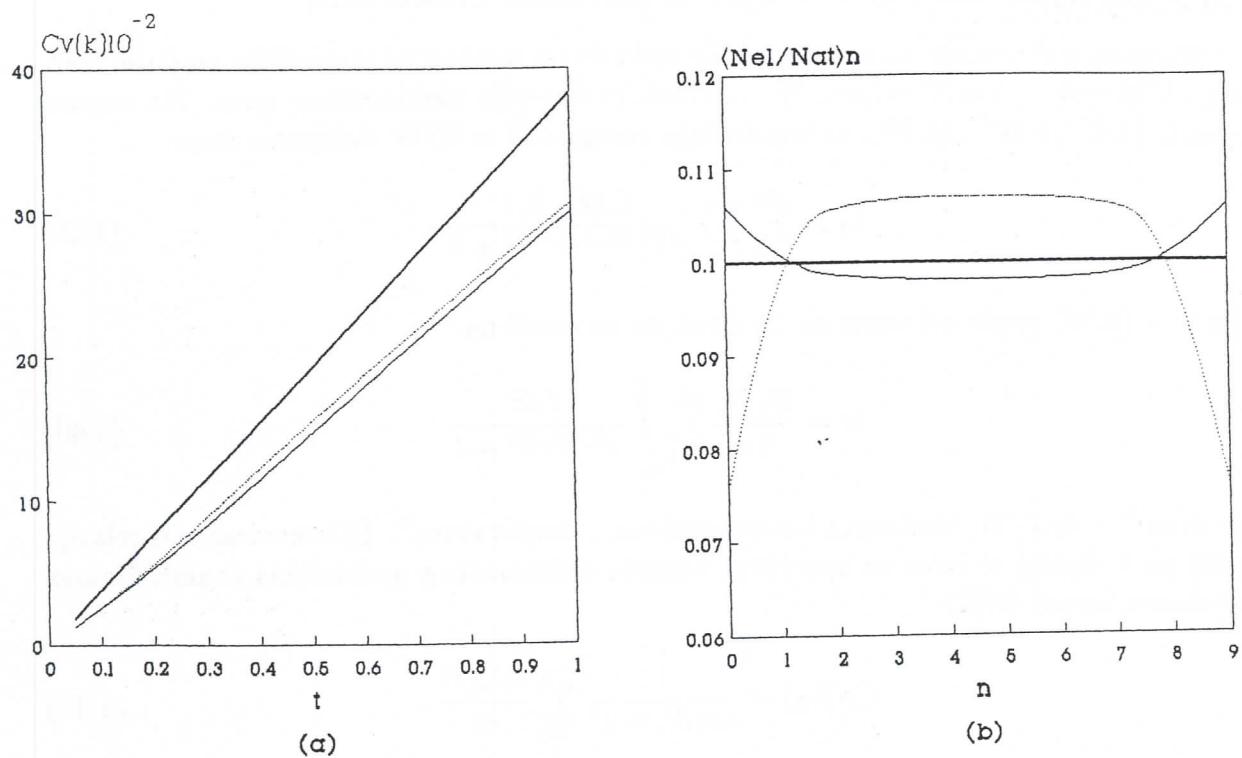
gde je sa $t = k_B T/W$ obeležena bezdimenzionala „temperatura”. Diferenciranjem relacije (4.40) po t , dobija se izraz za specifičnu toplotu elektronskog podsistema tankih filmova (po elementarnoj celiji):

$$C_V[k_B] = \frac{1}{4\pi(N_z + 1)} \sum_{\nu=1}^{\nu_m} \frac{dJ_\nu(t)}{dt} \quad (4.41)$$

gde je:

$$\begin{aligned} \frac{dJ_\nu(t)}{dt} = & \frac{\pi^2}{3} t - \frac{(\mathcal{E}_F - \Delta_\nu)^2}{t} + \mathcal{E}_F \ln \left[1 + e^{(\mathcal{E}_F - \Delta_\nu)/t} \right] - \frac{1}{t} \frac{\Delta_\nu (\mathcal{E}_F - \Delta_\nu)}{1 + e^{-(\mathcal{E}_F - \Delta_\nu)/t}} + \\ & + 2t \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n} e^{-n(\mathcal{E}_F - \Delta_\nu)/t} \left(\mathcal{E}_F - \Delta_\nu + \frac{t}{n} \right) \end{aligned} \quad (4.42)$$

Analiza izraza (4.42) na niskim temperaturama, kada je $\frac{\mathcal{E}_F - \Delta_\nu}{t} \gg 1$, pokazuje da na specifičnu toplotu veoma slabo utiču granični uslovi i debljina filma, pa se (4.42) praktično svodi na $\frac{dJ}{dt} = \frac{\pi^2}{3} t$. Po formi, ovaj izraz je isti kao i odgovarajući izraz za masivnu strukturu [12]. Na visokim temperaturama situacija je slična [62] tj. specifična toplota filma proporcionalna je prvom stepenu temperature. Zaključak izgleda paradoksalan, ali zbog visokih elektronskih energija i sobne temperature se mogu smatrati niskim, pa i za njih važi navedena aproksimacija. Numeričke kalkulacije, izvršene za masivnu strukturu i film, pokazuju linearnu zavisnost specifične toplote od temperature, s tim što je specifična toplota kod filma nešto niža nego kod masivne strukture. Rezultati su prikazani na slici 4.7(a). Puna linija se odnosi na balkovsku zavisnost specifične toplote od temperature, tanka linija odgovara Nojmanovim, a tačkasta linija Dirihleovim graničnim uslovima.



Sl.4.7 (a) Specifična toplota elektronskog gasa.
 (b) Distribucija elektrona po slojevima filma ($N_z = 9$).

Konačno, izvršen je proračun srednjeg broja elektrona po atomu za svaki sloj filma. Konačna formula koja se dobija iz (4.23) glasi:

$$\left\langle \frac{N_{el}}{N_{at}} \right\rangle_n = \frac{t}{4\pi(N_z + 1)} \sum_{\nu=1}^{\nu_m} g_{n,n}(\rho_\nu) \ln \left(1 + e^{\frac{\varepsilon_F - \Delta\nu}{t}} \right) \quad (4.43)$$

Gornja formula analizirana je numerički za Dirihićeve i Nojmanove granične uslove. Rezultati su prikazani na slici 4.7(b) za metalni film od deset slojeva (na niskim temperaturama, $t = 0.001$). Sa slike se vidi da Dirihićevi uslovi daju veće koncentracije elektrona na graničnim slojevima, dok je situacija sa Nojmanovim uslovima dijаметралno suprotna; najveća koncentracija elektrona je oko sredine filma. U oba slučaja, uticaj granica se oseća do (3.-4.) sloja od granica prema unutrašnjosti filma.

Prostorna distribucija nosilaca nailektrisanja računata je i za tanke filmove poluprovodnih materijala [90]. U slučaju *GaAs*, pri Dirihićevim graničnim uslovima (na sobnim temperaturama), koncentracija nosilaca u sredini filma je za red veličine iznad koncentracije na graničnim površinama. Za Nojmanove granične uslove, ta razlika je znatno manja, iznosi oko 50%.

Numerički proračuni koji su ovde vršeni pokazuju da se prostorna distribucija nosilaca može menjati promenom graničnih uslova što je od značaja za rad poluprovodničkih uređaja na bazi tankih filmova (poluprovodnički laseri) [91].

4.7 Oscilatorno ponašanje svojstava tankih filmova

U nizu radova, navode se empirijske činjenice da veliki broj karakteristika tankih filmova osciluje sa promenom njihove debljine [10, 12, 27, 28]. Treba odmah napomenuti da pomenuto oscilovanje nije primećeno u čistim metalnim filmovima (koncentracija oko jedan elektron po atomu) već kod provodnih materijala (intermetalna jedinjenja, polimetali, poluprovodnici i dr.) kod kojih je koncentracija slobodnih elektrona manja od jedan. U svim pomenutim radovima govori se o oscilatornoj zavisnosti transportnih i optičkih svojstava od debljine filma ali se ne formuliše teorija koja bi objasnila oscilacije termodinamičkih svojstava.

U ovom paragrafu pokušaćemo da pružimo teorijsko objašnjenje za oscilovanje Fermijeve energije, elektronske specifične topote tankih filmova kao i eneretskog gepa kod superprovodnih filmova. U tom cilju odredićemo graničnu vrednost koncentracije provodnih elektrona n_G pri kojoj se pojavljuju oscilacije. Pored toga ispitaćemo uticaj graničnih uslova na termodinamička svojstva tankih filmova pri $n \leq n_G$, kao i zavisnost perioda oscilovanja termodinamičkih karakteristika od koncentracije elektrona.

4.7.1 Oscilovanje Fermijeve energije i specifične topote

Za izračunavanje Fermijeve energije ponovo ćemo koristi izraz (4.37) u kome ν_m označava najvišu popunjenu elektronsku podzonu. Kod metala ova podzona se poklapa sa brojem slojeva, dok kod materijala sa malom elektronskom koncentracijom ν_m je manje od broja slojeva. Samo u ovom slučaju ($\nu_m \leq N_z$), kao što ćemo videti, dolazi do oscilovanja Fermijeve energije sa povećanjem debljine filma. Pored toga, Fermi energija zavisi i od izbora graničnih uslova. Može se pokazati da do oscilovanja dolazi ako je za Dirihićeove uslove koncentracija elektrona manja od:

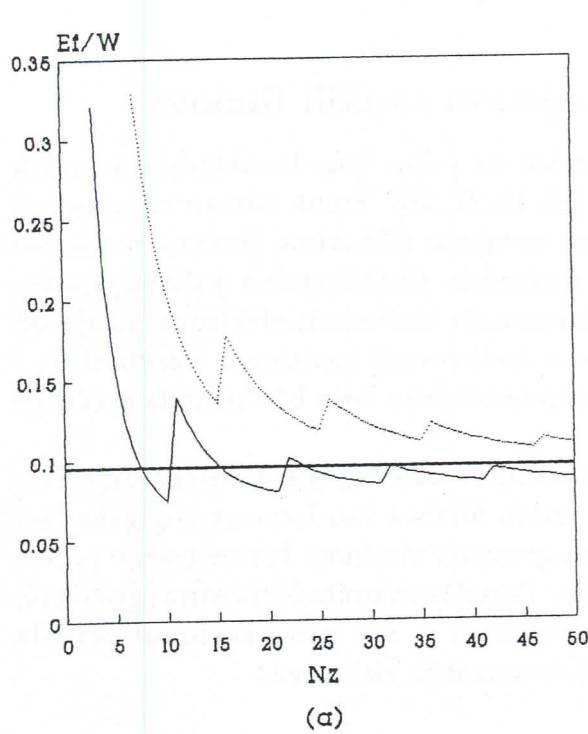
$$n_G^D = \frac{\pi}{12} \frac{N_z(4N_z + 5)}{(N_z + 2)^2}, \quad (4.44)$$

dok za Nojmanove uslove granična koncentracija iznosi:

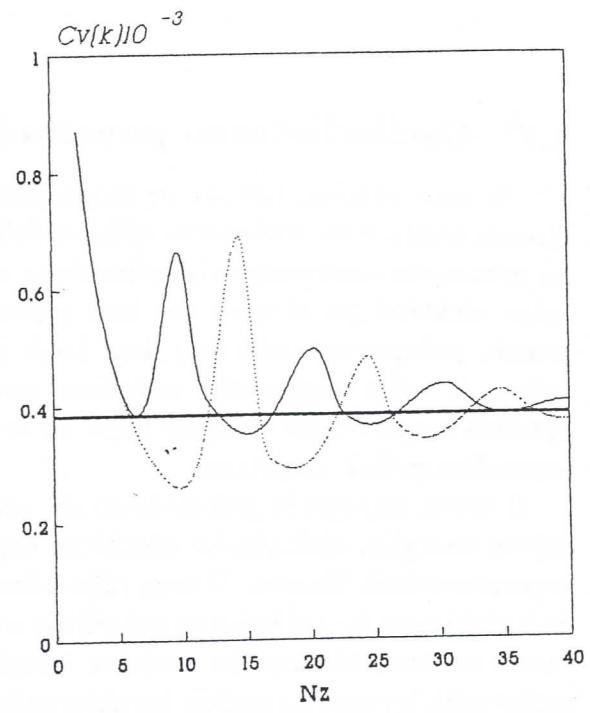
$$n_G^N = \frac{\pi}{12} \frac{N_z(4N_z^2 + 3N_z - 1)}{(N_z + 1)^3}. \quad (4.45)$$

Vidi se da je pri Dirihićevim uslovima granična vrednost koncentracije nešto niža od one koja sledi iz Nojmanovih uslova $n_G^D < n_G^N$.

Rezultati numeričke analize izraza (4.37) prikazani su na slici 4.8(a) pri koncentraciji od 10^{-3} slobodnih elektrona po atomu, kada je $\mathcal{E}_F = 0.096$ za masivni kristal. Sa slike se vidi da Dirihićev uslov vodi na nešto veću Fermijevu energiju ali je period oscilacija isti kao u slučaju Nojmanovih graničnih uslova.



(a)



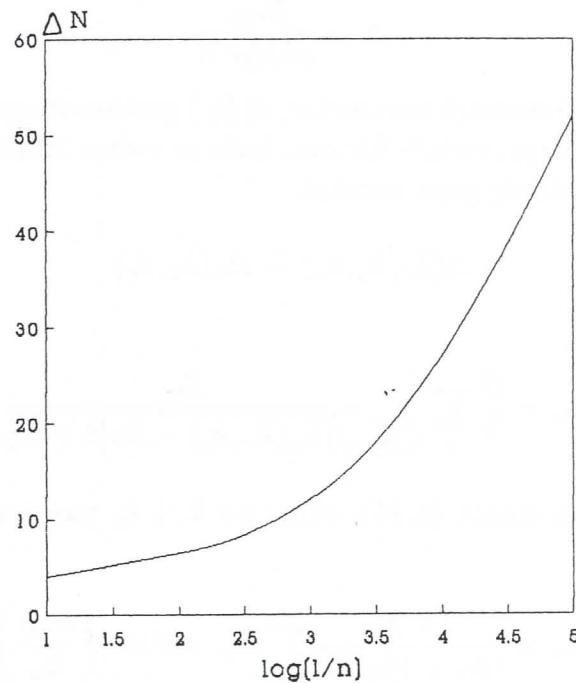
(b)

Sl.4.8 (a) Oscilacije Fermijeve energije i (b) specifične toplotе pri Nojmanovim (tačkasta linija) i Dirihielovim (tanka linija) graničnim uslovima. Pune linije predstavljaju balkovsku vrednost Fermijeve energije.

Osim Fermijeve energije, numerički je računata i specifična toplota elektronskog gasa pomoću relacije:

$$C_V[k_B] = \frac{1}{4\pi(N_z + 1)} \sum_{\nu=1}^{\nu_m} \int_{(\Delta_\nu - \varepsilon_F)/t}^{\infty} \frac{x(\varepsilon_F + tx)dx}{(e^x + 1)(e^{-x} + 1)} \quad (4.46)$$

Pošto specifična toplota zavisi od Fermijeve energije, osculatorno ponašanje ove veličine prenosi se i na specifičnu toplotu čiji je grafik prikazan na slici 4.8(b) pri koncentraciji elektrona od 10^{-3} i na temperaturi $t = 10^{-2}$, kada je za masivni kristal $C_V = 0.38k_B$. Rezultati sa ove slike pokazuju da period oscilacija specifične toplotе ne zavisi od graničnih uslova.



Sl.4.9 Zavisnost perioda oscilovanja od koncentracije elektrona $n \equiv N_{el}/N_{at}$.

Na kraju je ispitana i zavisnosti perioda oscilovanja ΔN od koncentracije elektrona slika 4.9. Sa slike se vidi da period oscilovanja raste pri smanjenju koncentracije elektrona.

Na osnovu izložene analize može se izvesti sledeći zaključak. Oscilatorno ponašanje termodinamičkih karakteristika tankih filmova posledica je nedovoljne popunjenoosti podzona električnog kvantovanja. Prema teorijskoj analizi koja je ovde data, oscilovanje se javlja usled popunjavanja većeg broja podzona prilikom povećanja debljine filma.

4.7.2 Oscilovanje energetskog gепа

Mada nas prevashodno interesuje normalno stanje tankih filmova, ovde ćemo se nakratko pozabaviti superprovodnim filmovima jer se i kod njih mogu pojaviti oscilatori efekti [78, 79, 92]. Pokazaćemo da se kao posledica oscilovanja Fermijevog nivoa pojavljuje i oscilatorna zavisnost parametra energetskog gепа od debljine filma.

U standardnoj BCS teoriji superprovodnosti [13], parametar energetskog gепа beskonačnog, homogenog uzorka na $0K$ određen je integralnom jednačinom:

$$|\Delta(\vec{p})| = -\frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} U(\vec{p}, \vec{k}) \frac{|\Delta(\vec{k})|}{\sqrt{(E_{\vec{k}} - E_F)^2 + |\Delta(\vec{k})|^2}} \quad (4.47)$$

gde je: $U(\vec{p}, \vec{k})$ matrični element rasejanja Kuperovog para. Obično se prepostavlja da su $U(\vec{p}, \vec{k}) = -U$ i $\Delta(\vec{p}) = \Delta$ konstantni za $|E_{\vec{k}} - E_F| < \hbar \omega_D$. Pomoću gustine stanja (2.103), prelazi se sa sume po stanjima na integral, tako da se konačno dobija:

$$\Delta = \frac{\hbar\omega_D}{\sinh[\rho^{-1}]} \quad (4.48)$$

gde je $\rho = d(E_F)U$ bezdimenzionalni parametar, $d(E_F)$ gustina stanja na Fermijevom nivou. U slučaju tankih superprovodnih filmova, kada je veoma izražena dimenzionalna kvantizacija, parametar energetskog gepa postaje,

$$\Delta(k_x, k_y, k_z) \rightarrow \Delta_\nu(k_x, k_y)$$

i zadovoljava jednačinu:

$$\Delta_\nu = \frac{U}{2} \sum_{\mu} \sum_{k_x, k_y} \frac{\Delta_\mu}{\sqrt{[E_\mu(k_x, k_y) - E_F]^2 + \Delta_\mu^2}}. \quad (4.49)$$

Pomoću lokalnih gustina stanja (4.34), sume po k_x i k_y mogu se izračunati analitički. Tako se dobija:

$$\Delta_\nu = \frac{\pi \rho}{(N_z + 1)\sqrt{E_F}} \sum_{\mu=1}^{\mu_m} \Delta_\mu \operatorname{arsinh} \left(\frac{\hbar\omega_D}{\Delta_\mu} \right) \quad (4.50)$$

gde je indeks najvišeg zaposednutog nivoa μ_m određen iz uslova:

$$\eta_{\mu_m} < E_F + \hbar\omega_D < \eta_{\mu_m+1}$$

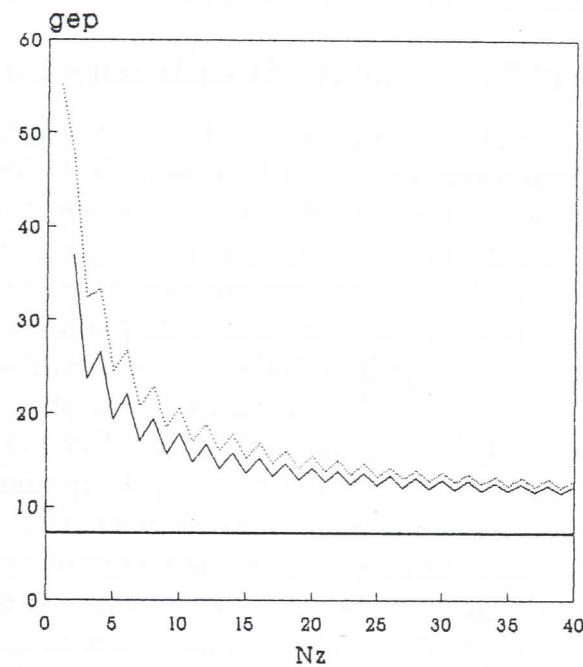
(η_μ minimalna energija podzona). Ako pretpostavimo da je $E_F \gg \hbar\omega_D$, kada energetski gep Δ ne zavisi od indeksa podzone [79], iz jednačine (4.50) dobija se eksplisitno:

$$\Delta = \frac{\hbar\omega_D}{\sinh[(N_z + 1)\sqrt{E_F}/(\pi\mu_m\rho)]} \quad (4.51)$$

Poslednja formula omogućava da se ispita zavisnost parametra energetskog gepa od debljine filma. Za različite debljine filma (N_z) treba najpre odrediti Fermijevu energiju E_F i maksimalni indeks podzone μ_m pomoću jednačine (4.37). Na slici 4.10 su prikazani rezultati za sledeći izbor parametara:

$$\frac{N_e}{N_a} = 0.1; \quad \hbar\omega_D = 100K; \quad \rho = 0.3$$

kada energetski gep masivnog uzorka ima vrednost $\Delta_{balk} = 7.144K$.



Sl.4.10 Parametar energetskog gepa kao funkcija debljine filma pri različitim graničnim uslovima. Puna linija odgovara balkovskoj vrednosti gepa.

Dobijene vrednosti energetskog gepa tankih filmova su iznad balkovske vrednosti i pokazuju oscilatornu zavisnost od debljine filma. Sa slike se vidi da granični uslovi utiču na vrednosti energetskog gepa ali ne i na period njegovih oscilacija. Nojmanovi granični uslovi daju nešto veće vrednosti gepa od Dirihleovih. Amplituda oscilacija energetskog gepa opada sa porastom debljine filma kao u slučaju Fermijeve energije. Na kraju napomenimo da bi se u slučaju metalnih superprovodnih filmova dobila monotona zavisnost gepa od debljine filma.

5 MAGNETNA SVOJSTVA TANKIH FILMOVA

5.1 Fizičko poreklo i značaj bikvadratne interakcije

Poslednjih godina intenzivirana su istraživanja tankih magnetnih filmova i višeslojnih magnetika, kako sa eksperimentalne, tako i sa teorijske tačke gledišta. Novije eksperimentalne tehnike, posebno difrakcija niskoenergetskih elektrona (LEED) i nuklearna magnetna rezonancija (NMR) omogućavaju precizna merenja lokalnih veličina kao npr. magnetizacije, susceptibilnosti itd., što dopunski stimuliše i eksperimentalna i teorijska istraživanja. Pored toga, postoji i sve veći interes za praktičnu primenu ovih materijala naročito u industriji magnetnih uređaja. Tako su višeslojni magnetni sistemi sa nemagnetnim metalnim međuslojem, postali osnova za proizvodnju različitih novih uređaja, posebno ultramalih memorijskih senzora koji koriste fenomen gigantske magnetne otpornosti [93]. U izvanrednom revijalnom članku [94] opisane su sve eksperimentalne tehnike pogodne za ispitivanje magnetnih filmova, površina i međupovršina, kao i neki teorijski rezultati za magnetne filmove preko Hajzenbergovog modela sa bilinearnom interakcijom, uračunavajući i promenu parametara anizotropije na površini u odnosu na balk. Takođe postoje radovi u kojima se analiziraju magnetne karakteristike filmova pomoću Izing-ovog modela, uzimajući u obzir da neki fizički i hemijski uslovi na površini mogu promeniti površinsku interakciju izmene $J_s \neq J$ (videti npr. [95] kao i niz referenci koje su tamo citirane).

U ovoj glavi želimo da analiziramo neke osobine tankih magnetnih filmova u kojima između spinova pored bilinearne postoji i bikvadratna interakcija izmene. Egzistencija bikvadratne interakcije u masivnim magneticima ustanovljena je relativno davno [96], [97], [98]. Značajna uloga terma bikvadratne izmene u spiskom hamiltonijanu nekih magnetnih izolatora istaknuta je u radovima [99], [100] i [101]. Efekti bikvadratne interakcije izmene analizirani su u velikom broju radova, primenom različitih teorijskih metoda [28], [102], [103], [104], [105] itd. S druge strane bikvadratna interakcija izmene između spinova ultratankih feromagnetskih filmova, višeslojnih magnetika i sendvič struktura otkrivena je tek nedavno. Prvo je u sendvič strukturi $Fe - Cr - Fe$, sa klinastim međuslojem pronađeno da se veličina i znak interakcije izmene oscilatorno menjaju u funkciji debljine međusloja i to pomoću skanirajuće elektronske mikroskopije i Briluenovog rasejanja svetlosti (BLS) [107]. Nadalje, u prelaznoj regiji između feromagnetne i antiferomagnetne bilinearne interakcije, pronađeni su neuobičajeni domenski uzorci pomoću magnetooptičkog (Kerovog) efekta (MOKE) [108], [109]. Ove neobične karakteristike su pripisane postojanju nagiba između pravca magnetizacije u dva Fe sloja, koji se nije mogao objasniti preko konvencionalne fero ili antiferomagnetne bilinearne interakcije među slojevima. Uvođenjem bikvadratne interakcije među slojevima [108] objašnjena je zavisnost magnetizacije od polja na $T = 0$ i pokazano da nagibni ugao zavisi od odnosa bilinearne i bikvadratne interakcije.

Nedavno je takođe evidentirano simultano postojanje bilinearne i bikvadratne interakcije među magnetnim slojevima kod troslojnog uzorka $Fe - Cu - Fe$ pomoću površinskog MOKE i feromagnetnih rezonantnih merenja (FMR). Sastavim nedavno, pomoću MOKE i BLS pokazano je postojanje bikvadratne i bilinearne interakcije u epitaksijalnim $Fe | Cr | Fe | Ag | GaAs(100)$ strukturama [111], zatim bikvadratne interakcije u $Fe | Zr$ superrešetkama [112] (pomoću FMR i VSM-vibrating sample magnetometer), dok je kod $Fe | FeSi$ multislojeva [113] pokazan prelaz od antiferomagnetne ka bikvadratnoj interakciji sa opadanjem temperature.

Što se tiče fizičkog porekla bikvadratne interakcije u masivnim strukturama treba svakako ukazati na klasičan rad Nagaeva [115]. Poreklo bikvadratne interakcije u višeslojnim magnetnim sistemima, među prvima je razmatrao Slončenski [116] koji je predložio u suštini makroskopski model po kojem bikvadratna interakcija nastaje usled prostorne fluktuacije bilinearne interakcije prouzrokovane „terasastim“ fluktuacijama debljine nemagnetnog međusloja (na monoslojnoj skali). Nakon toga su Barnaš [117] i Grinberg [118] elaborirali dva moguća mikroskopska mehanizma koji dovode do bikvadrante interakcije i u slučaju idealno ravnih međupovršina. Kod jednog mehanizma, bikvadratni term se pojavljuje kao rezultat kompeticije između inter- i intra-slojne interakcije izmene, dok se drugi mehanizam bazira na činjenici da elektronske talasne funkcije, odgovorne za interakciju, zavise od relativnih orientacija magnetizacija u feromagnetnim filmovima. Svakako treba spomenuti i rad Eriksona i dr. [119] u kojem je, preko modela slobodnih elektrona, razmatrana interakcija izmene između feromagnetnih filmova prelaznih metala odvojenih paramagnetnim međuslojem. Model je primenljiv na troslojne strukture kao što su $Fe | Cr | Fe$ ili $Co | Ru | Co$, kod kojih su energetske zone spina dole (\downarrow) u feromagneticima podudarne sa onima u paramagnetnom međusloju, dok elektroni sa spinom gore (\uparrow) osećaju repulzivni potencijal (barijera čija je visina proporcionalna izmenskom energetskom procepu u feromagneticima), koji nastaje usled nedostatka odgovarajućih stanja u međusloju. U okviru ovog modela pokazano je da se u razvoju energije interakcije pojavljuje beskonačna suma članova koji odgovaraju bilinearnoj, bikvadratnoj i višim stepenima interakcije među momentima feromagnetika. Koeficijenti bilinearne ($A_{1,2}$) i bikvadratne ($B_{1,2}$) interakcije osciluju sa debljinom međusloja tako da je u nekim oblastima moguće da bude $B_{1,2}$ veci od $A_{1,2}$.

Upravo gore navedeni teorijski i eksperimentalni radovi podstakli su nas da analiziramo neke karakteristike tankih magnetnih filmova u zavisnosti od odnosa bilinearne i bikvadratne interakcije izmene [120]. Koristićemo pojednostavljeni model sa prostom kubnom strukturu i aproksimaciju najbližih suseda u kojem obe interakcije među spinovima postoje kako između slojeva tako i u samim slojevima. Struktura ovog poglavlja je sledeća. Najpre ćemo definisati Hamiltonian sistema u aproksimaciji srednjeg polja a zatim analizirati neke termomagnetne karakteristike tankih filmova. Linearizacijom jednačina kretanja za spinske operatore izračunat je spektar spinskih talasa u filmu kako na $T = 0K$ tako i na $T \neq 0K$. Na kraju ćemo diskutovati rezultate dobijene analitički i numerički.

5.2 Hamiltonijan modela. Osnovne jednačine

Kao što smo napomenuli, razmatraćemo feromagnetni film sa $(N + 1)$ - slojeva, translatornom simetrijom u XY -ravnima i osom z normalnom na film. Među magnetnim momentima deluje bilinearna Hajzenbergova interakcija izmene $I_{\vec{n},\vec{m}} > 0$ i bikvadratna interakcija izmene $K_{\vec{n},\vec{m}} \equiv a I_{\vec{n},\vec{m}}$. Interakcija između najbližih suseda ima vrednost I u balku i između površinskih slojeva i balka. Uticaj površina filma izrazićemo promenom površinske interakcije u odnosu na balkovsku, ($\epsilon_0 = I_0/I$ i $\epsilon_N = I_N/I$) što je svakako uprošćavanje realne situacije, ali je naš osnovni cilj da analiziramo uticaj bikvadratne interakcije na neke karakteristike sistema.

Hamiltonijan sistema možemo napisati u obliku [28], [116]:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{\vec{i}\vec{j}} I_{\vec{i}\vec{j}} \hat{\vec{S}}_{\vec{i}} \hat{\vec{S}}_{\vec{j}} - \frac{a}{2} \sum_{\vec{i}\vec{j}} I_{\vec{i}\vec{j}} \left(\hat{\vec{S}}_{\vec{i}} \hat{\vec{S}}_{\vec{j}} \right)^2 - g \mu_B \mathcal{H} \sum_{\vec{i}} \hat{\vec{S}}_{\vec{i}}^z \quad (5.1)$$

gde smo uveli i Zemanov term sa poljem u pravcu z -ose (osa kvantizacije), koja nam u stvari uvodi „Izingovsku“ simetriju u hamiltonijan. Ako pored operatora dipolnih magnetnih momenata ($\hat{S}^x, \hat{S}^y, \hat{S}^z$) uvedemo operatore kvadrupolnih momenata [28]:

$$\hat{Q}_{\vec{n}}^0 = 3(\hat{S}_{\vec{n}}^z)^2 - S(S+1), \quad \hat{Q}_{\vec{n}}^2 = (\hat{S}_{\vec{n}}^x)^2 - (\hat{S}_{\vec{n}}^y)^2, \quad \hat{Q}_{\vec{n}}^{\alpha,\beta} = \hat{S}_{\vec{n}}^\alpha \hat{S}_{\vec{n}}^\beta + \hat{S}_{\vec{n}}^\beta \hat{S}_{\vec{n}}^\alpha \quad (5.2)$$

$$\alpha \neq \beta = x, y, z$$

hamiltonijan (5.1) dobija oblik koji je naročito pogodan za analizu u aproksimaciji srednjeg polja:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -\frac{1}{2} \sum_{\vec{i}\vec{j}} I_{\vec{i}\vec{j}} \left(1 - \frac{a}{2} \right) \hat{\vec{S}}_{\vec{i}} \hat{\vec{S}}_{\vec{j}} - \\ & - \frac{a}{2} \sum_{\vec{i}\vec{j}} I_{\vec{i}\vec{j}} \left(\frac{1}{6} \hat{Q}_{\vec{i}}^0 \hat{Q}_{\vec{j}}^0 + \frac{1}{2} \hat{Q}_{\vec{i}}^2 \hat{Q}_{\vec{j}}^2 + \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \hat{Q}_{\vec{i}}^{\alpha,\beta} \hat{Q}_{\vec{j}}^{\alpha,\beta} \right) - g \mu_B \mathcal{H} \sum_{\vec{i}} \hat{S}_{\vec{i}}^z \end{aligned} \quad (5.3)$$

Za gornji model, hamiltonijan u aproksimaciji srednjeg polja uvodimo na standardan način. Operatori u (5.1) se prikazuju u obliku sume srednje vrednosti i fluktuirajućeg dela, $\hat{A} = \langle A \rangle_{MF} + (\hat{A} - \langle A \rangle_{MF}) = \langle A \rangle_{MF} + \delta \hat{A}$ i zanemarivanjem članova proporcionalnih $(\delta \hat{A})^2$). Imajući u vidu da je zbog Izingove simetrije u XY - ravni:

$$\begin{aligned} \langle S_{\vec{i}}^x \rangle = \langle S_{\vec{i}}^y \rangle = 0, \quad \langle Q_{\vec{i}}^z \rangle = \langle Q_{\vec{i}}^{\alpha,\beta} \rangle = 0, \quad \langle S_{\vec{i}}^z \rangle = \sigma_n, \quad \langle Q_{\vec{i}}^0 \rangle = q_n \\ (n = 0, 1, 2, \dots N) \end{aligned}$$

na taj način se dobija:

$$\hat{H}_{MF} = \hat{H}_0 - \frac{1}{2} \langle \hat{H}_0 \rangle \quad (5.4)$$

gde je:

$$\hat{H}_0 = -N_x N_y \sum_{n=0}^N \left(\bar{\mathcal{H}}_n \hat{S}_n^z + \bar{\mathcal{K}}_n \hat{Q}_n^0 \right) \quad (5.5)$$

dok $N_x N_y$ - predstavlja broj čvorova u XY -ravni.

Srednja polja $\bar{\mathcal{H}}_n$ i $\bar{\mathcal{K}}_n$ za proizvoljne granične uslove glase:

$$\begin{aligned}
 n &= 0 \\
 \bar{\mathcal{H}}_0 &= (1 - \frac{a}{2})(4I_0\sigma_0 + I\sigma_1) + g\mu_B\mathcal{H} \\
 \bar{\mathcal{K}}_0 &= \frac{a}{6}(4I_0q_0 + Iq_1) \\
 n &= N \\
 \bar{\mathcal{H}}_N &= (1 - \frac{a}{2})(4I_N\sigma_N + I\sigma_{N-1}) + g\mu_B\mathcal{H} \\
 \bar{\mathcal{K}}_N &= \frac{a}{6}(4I_Nq_N + Iq_{N-1}) \\
 1 \leq n \leq N-1 \\
 \bar{\mathcal{H}}_n &= (1 - \frac{a}{2})I(4\sigma_n + \sigma_{n+1} + \sigma_{n-1}) + g\mu_B\mathcal{H} \\
 \bar{\mathcal{K}}_1 &= \frac{a}{6}I(4q_n + q_{n+1} + q_{n-1}) \tag{5.6}
 \end{aligned}$$

Konstantni član u (5.4) naravno ne utiče na svojstvene vrednosti hamiltonijana ali ulazi u izraz za slobodnu energiju F i samim tim utiče na magnetizaciju sistema s obzirom da zavisi kako od srednjih dipolnih σ_n tako i srednjih kvadrupolnih q_n momenata.

Mi ćemo nadalje razmatrati konkretno slučaj feromagnetika sa spinom $S = 1$, s obzirom da se u tom slučaju u balk sistemu sa Izingovom simetrijom javljaju dva tipa uređenja [28]:

- **feromagnetno**, za $0 < a < 1$, koje se karakteriše parametrima $\sigma_n \neq 0$ i $q_n \neq 0$ za $0 \leq T \leq T_C$ i
- **ferokvadrupolno**, za $a > 1$, koje se karakteriše parametrima $\sigma_n = 0$ i $q_n \neq 0$ za $0 \leq T \leq T_C$.

Kao što će se kasnije videti i u tankim filmovima, sa Izingovom simetrijom, takođe se pojavljuju ta dva tipa uređenja.

Slobodnu energiju sistema u aproksimaciji srednjeg polja možemo naći preko statističke sume Z_0 hamiltonijana \hat{H}_0 ($\Theta \equiv k_B T$):

$$F = -\Theta \ln Z_0 - \frac{1}{2} \langle \hat{H}_0 \rangle \tag{5.7}$$

gde je

$$Z_0 = \text{Tr} \left\{ e^{-\hat{H}_{MF}/\Theta} \right\} \tag{5.8}$$

Posle jednostavnog računa dobijamo za slobodnu energiju „po čvoru” u slojevima filma:

$$\mathcal{F} \equiv \frac{F}{N_x N_y} = -\Theta \sum_{n=0}^N \left\{ \frac{\bar{\mathcal{K}}_n}{\Theta} + \ln \left[e^{-3\bar{\mathcal{K}}_n/\Theta} + 2 \cosh(\bar{\mathcal{H}}_n/\Theta) \right] \right\} + \frac{1}{2} \sum_{n=0}^N (\sigma_n \bar{\mathcal{H}}_n + q_n \bar{\mathcal{K}}_n) \quad (5.9)$$

i za energiju osnovnog stanja ($T = 0K$):

$$\mathcal{E}_0 \equiv \frac{E_0}{N_x N_y} = -\frac{1}{2} \sum_{n=0}^N [\sigma_n(0) \bar{\mathcal{H}}_n(0) + q_n(0) \bar{\mathcal{K}}_n(0)] \quad (5.10)$$

U slučaju feromagnetskog (FM) osnovnog stanja ($S = 1$), kada je $\sigma_n(0) = 1$ i $q_n(0) = 1$, na osnovu (5.10) (za $\mathcal{H} = 0$) dobijamo:

$$\mathcal{E}_0^{FM} = -\frac{1}{2} \left(1 - \frac{a}{3} \right) [4I_0 + 4I_N + I(6N - 4)] \quad (5.11)$$

Za ferokvadrupolno osnovno stanje $\sigma_n(0) = 0$ i $q_n(0) = -2$, dobijamo:

$$\mathcal{E}_0^{FQ} = -\frac{a}{3} [4I_0 + 4I_N + I(6N - 4)] \quad (5.12)$$

Iz (5.11) i (5.12) sledi da je na $T = 0K$ za $0 \leq a < 1$ sistem u feromagnetskom stanju, dok je za $a > 1$ u ferokvadrupolnom stanju. Za $a = 1$ imamo degeneraciju jer oba stanja imaju istu energiju, što se poklapa sa rezultatom za balk [28].

Srednji dipolni $\sigma_n(T)$ i kvadrupolni $q_n(T)$ moment po sloju dobijamo iz uslova minimuma slobodne energije:

$$\frac{\partial F}{\partial \sigma_n} = 0 \quad \frac{\partial F}{\partial q_n} = 0$$

što daje:

$$\sigma_n = \frac{2 \sinh(\bar{\mathcal{H}}_n/\Theta)}{e^{-3\bar{\mathcal{K}}_n/\Theta} + 2 \cosh(\bar{\mathcal{H}}_n/\Theta)} \quad (5.13)$$

$$q_n = \frac{6 \cosh(\bar{\mathcal{H}}_n/\Theta)}{e^{-3\bar{\mathcal{K}}_n/\Theta} + 2 \cosh(\bar{\mathcal{H}}_n/\Theta)} = 3\sigma_n \coth(\bar{\mathcal{H}}_n/\Theta) - 2 \quad (5.14)$$

$$n = 0, 1, 2, \dots, N$$

Gornji izrazi se svode na balkovske relacije za σ i q [28] ako odaberemo srednja polja:

$$\bar{\mathcal{H}}_n \equiv \left(1 - \frac{a}{2} \right) J(0) \sigma, \quad \bar{\mathcal{K}}_n \equiv \bar{\mathcal{K}} = \frac{a}{6} J(0) q, \quad J(0) = 6 I.$$

S obzirom na oblik jednačina (5.13) i (5.14) jasno je da se one mogu rešavati samo numerički u celom intervalu temperatura ($0 \leq T \leq T_C$) što ćemo i uraditi u sledećoj sekciji. Analitički se mogu rešiti samo linearizacijom u okolini tačke faznog prelaza i to u slučaju kada u sistemu postoji fazni prelaz druge vrste. Kao što ćemo videti, u slučaju sistema sa bikvadratnom interakcijom fazni prelaz druge vrste postoji samo u feromagnetskoj fazi za $a < 2/3$ (videti takođe [28]), dok je za $2/3 < a < 1$ fazni prelaz prve vrste kao i za $a > 1$ u ferokvadrupolnoj fazi.

5.3 Termomagnetna svojstva tankih filmova

Pomoću sistema kuplovanih diferencnih jednačina (5.13 – 14), ovde ćemo analizirati temperatursku zavisnost parametara uređenosti σ_n i q_n i specifičnu toplotu tankih feromagnetnih filmova. Osnovni cilj ovih analiza jeste da se ispita uticaj bikvadratne interakcije i graničnih uslova na termomagnetna svojstva tankih filmova u različitim fazama. Pošto su ove jednačine nelinearne, one se u opštem slučaju moraju rešavati numerički što ćemo i uraditi. Pre toga ćemo razmotriti analitički proračun kritične temperature T_C čija se vrednost može značajno razlikovati od balkovske.

5.3.1 Kritična temperatura

U okolini $\Theta \approx \Theta_C$ iz jednačina (5.14) sledi $q_n \approx \sigma_n^2$, tako da u linearnoj aproksimaciji po σ_n iz jednačine (5.13) dobijamo sledeći sistem:

$$\hat{\mathcal{D}}_{N+1}(\rho; \alpha_0, \alpha_N) \vec{\sigma} = \vec{h} \quad (5.15)$$

gde je:

$$\hat{\mathcal{D}}_{N+1}(\rho; \alpha_0, \alpha_N) = \begin{pmatrix} \rho + \alpha_0 & -1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & \rho & -1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & \rho & -1 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ . & . & . & . & \ddots & . & . & . & . \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & -1 & \rho & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & -1 & \rho & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & -1 & \rho + \alpha_N \end{pmatrix} \quad (5.16)$$

$$\rho = \frac{3\Theta}{I(2-a)} - 4, \quad \alpha_0 = 4(1-\varepsilon_0), \quad \alpha_N = 4(1-\varepsilon_N)$$

$$\vec{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_0 \\ \sigma_1 \\ . \\ . \\ \sigma_N \end{pmatrix} \quad \vec{h} = \bar{\mu} \begin{pmatrix} \mathcal{H}_0 \\ \mathcal{H}_1 \\ . \\ . \\ \mathcal{H}_N \end{pmatrix}$$

$\bar{\mu} = \frac{3g\mu_B\Theta}{I(2-a)}$, \vec{h} - nehomogeno spoljašnje polje ⁷. Nije teško videti da se determinanta D_{N+1} matrice (5.16) može napisati u obliku:

$$D_{N+1}(\rho; \alpha_0, \alpha_N) = T_{N+1}(\rho) + (\alpha_0 + \alpha_N) T_N(\rho) + \alpha_0 \alpha_N T_{N-1}(\rho) \quad (5.17)$$

gde su $T_n(\rho)$ polinomi tipa Čebiševa ⁸

$$T_{N+1}(\rho) = \frac{\sin(N+2)\xi}{\sin \xi}; \quad \rho = 2 \cos \xi \quad (5.18)$$

⁷Spoljašnje polje se ovde uvodi formalno

⁸Videti Dodatak A1

Da bi imali spontanu magnetizaciju za $\Theta \leq \Theta_C$ ($\sigma_n \neq 0$, za $\vec{h} = 0$) mora determinanta sistema (5.15) biti jednaka nuli, što daje temperature mogućih faznih prelaza,

$$\Theta_C^{(\nu)} = \frac{(4 + \rho_\nu)I(2 - a)}{3}, \quad \nu = 1, 2, \dots, N + 1 \quad (5.19)$$

gde su ρ_ν - nule polinoma (5.17).

Nule polinoma (5.17) mogu se lako odrediti numeričkim putem, a analitički samo za neke specijalne vrednosti površinskih parametara (α_0, α_N).

1. **Slobodne površine:** $\alpha_0 = \alpha_N = 0$, odnosno $\varepsilon_0 = \varepsilon_N = 1$. Imajući u vidu (5.18) za nule polinoma (5.17) dobijamo:

$$\rho_\nu = 2 \cos \xi_\nu, \quad \xi_\nu = \frac{\pi}{N_z + 2} \nu, \quad \nu = 1, 2, \dots, N_z + 1 \quad (5.20)$$

Svakoj vrednosti ρ_ν odgovara tačka faznog prelaza, što znači da se u sistemu pojavljuje $N + 1$ tačaka faznog prelaza. Analizom slobodne energije sistema u okolini $\Theta_C^{(\nu)}$ tj. u okviru Landauove teorije faznih prelaza [124] može se pokazati da najvišoj tački prelaza $\Theta_C^{(1)}$ odgovara stabilna faza u čitavom temperaturskom intervalu $0 < \Theta < \Theta_C^{(1)}$, dok drugim temperaturama ($\Theta_C^{(\nu)} < \Theta_C^{(1)}$) odgovaraju metastabilne i nestabilne faze. Detalji ove analize za jako tanke filmove u okviru Izingovog modela dati su u radu [95]. Numerička analiza koja je ovde izvršena, pokazuje ponašanje magnetizacije po slojevima upravo u stabilnoj fazi, koja odgovara minimumu slobodne energije. Analiza izraza (5.20) daje sledeće:

- Za $N = 0$ dobija se $\rho_1 = 0$ i

$$\Theta_C^{(1)} = \frac{4I(2 - a)}{3} \quad (5.21)$$

što odgovara rezultatu teorije srednjeg polja za $D = 2$ (4 - suseda).

- Za $N \rightarrow \infty$ kada $\rho_1 \rightarrow 2$ dobija se

$$\Theta_C^{(1)} = \frac{6I(2 - a)}{3} \quad (5.22)$$

što odgovara rezultatu teorije srednjeg polja za $D = 3$ (6 - suseda) [28].

- Za $N \geq 2$ ali konačno, vidimo da je uvek $\Theta_C^{(1)} < \Theta_C$ tj. za slobodne površine tačka faznog prelaza stabilne faze je uvek niža od balkovske vrednosti.

2. **Idealne površine:** $\alpha_0 = \alpha_N = -1$, odnosno $\varepsilon_0 = \varepsilon_N = 5/4$. I u ovom slučaju se nule polinoma (5.17) mogu odrediti analitički,

$$\rho_\nu = 2 \cos \left(\frac{\pi \nu}{N_z + 1} \right), \quad \nu = 1, \dots, N + 1 \quad (5.23)$$

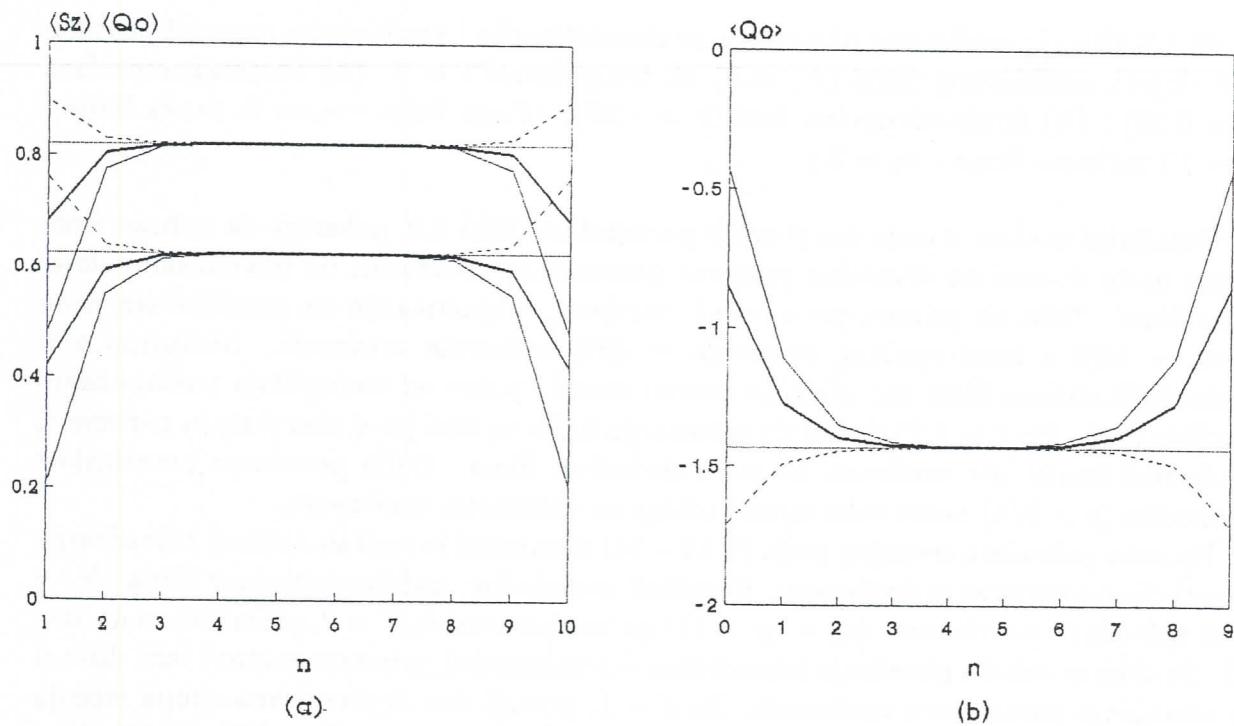
Najvišoj vrednosti $\rho_1 = 2$ odgovara balkovska temperatura (5.22) nezavisno od debljine filma pošto je $4\epsilon I + I = 6I$.

U najopštijem slučaju $\varepsilon_0 \neq \varepsilon_N \neq 1$ tačke mogućih faznih prelaza (5.19) dobijaju se nakon numeričkog izračunavanja nula polinoma (5.17).

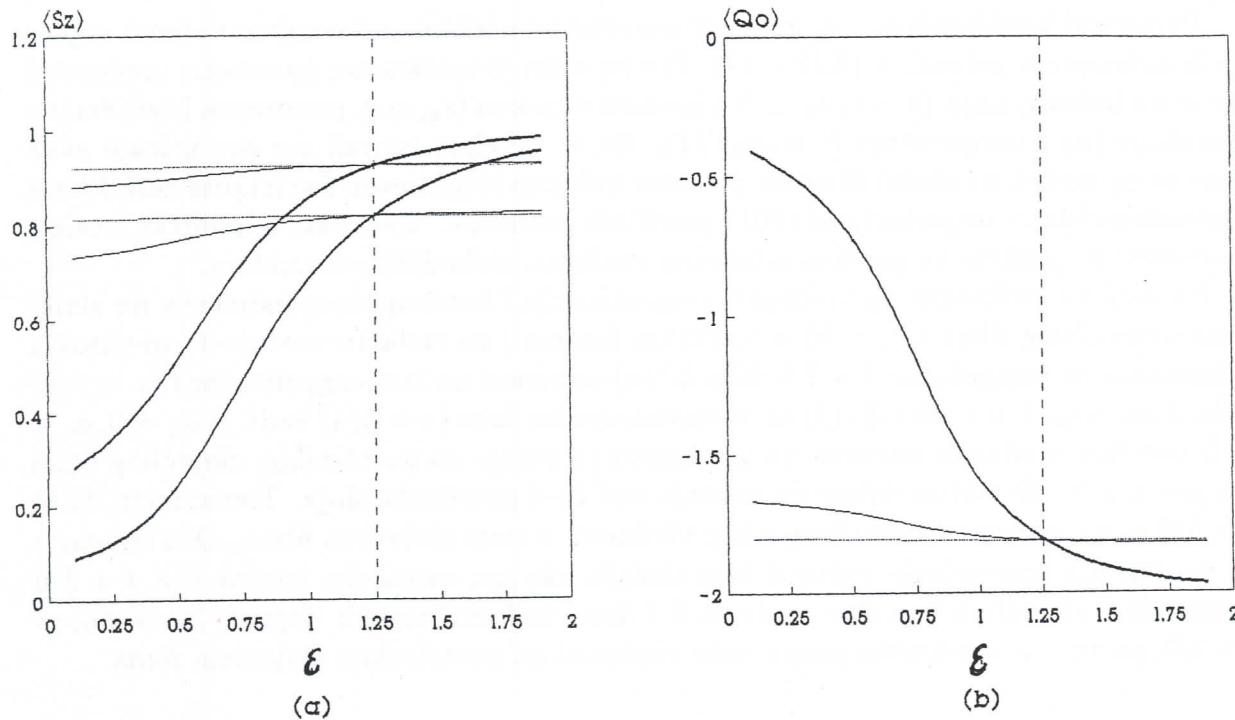
5.3.2 Parametri uređenosti

Parametri uređenosti σ_n i q_n mogu se odrediti numeričkim rešavanjem sistema kuplovanih nelinearnih jednačina (5.13 – 14). Prema ovim jednačinama, parametri uređenosti zavise od indeksa sloja ($n = 0, 1, \dots, N$), graničnih uslova ($\varepsilon_0, \varepsilon_N$), parametra bikvadratne interakcije (a) i temperature ($t = k_B T/I$). Da bi detaljno ispitali sve ove uticaje ovde ćemo se ograničiti na slučaj filma sa prostom kubnom struktukrom (konstanta rešetke a_0) i kristalografskom orientacijom (001) graničnih površina. Rezultati numeričke analize ilustrovani su grafički za pažljivo odabrane vrednosti slobodnih parametara.

Na slici 5.1 prikazane su vrednosti magnetizacije i kvadrupolnog momenta po slojevima simetričnog filma ($N_z = 9$) u različitim fazama i za različite vrednosti površinskih parametara na temperaturi $t = 2.5$. Slika 5.1(a) se odnosi na feromagnetnu fazu ($a = 1/4$) kada je $\sigma_n > q_n > 0$ a slika 5.1(b) na ferokvadrupolnu fazu ($a = 5/4$) kada je $\sigma_n = 0, q_n < 0$. U obe faze vrednosti parametara uređenosti su manje na površinskim slojevima filma ako je $\varepsilon < 5/4$. Te razlike dolaze do izražaja kod 3–4 površinska sloja. Treba uočiti da za $\varepsilon = 5/4$ parametri uređenosti imaju iste vrednosti u svim slojevima filma. Ova činjenica ne predstavlja iznenađenje pošto u tom slučaju ukupna interakcija izmene $4\varepsilon I + I$ u površinskim slojevima ima istu vrednost 6 I kao i kod unutrašnjih slojeva. Konačno, za $\varepsilon > 5/4$ parametri uređenosti imaju veće vrednosti na površinskim slojevima filma.



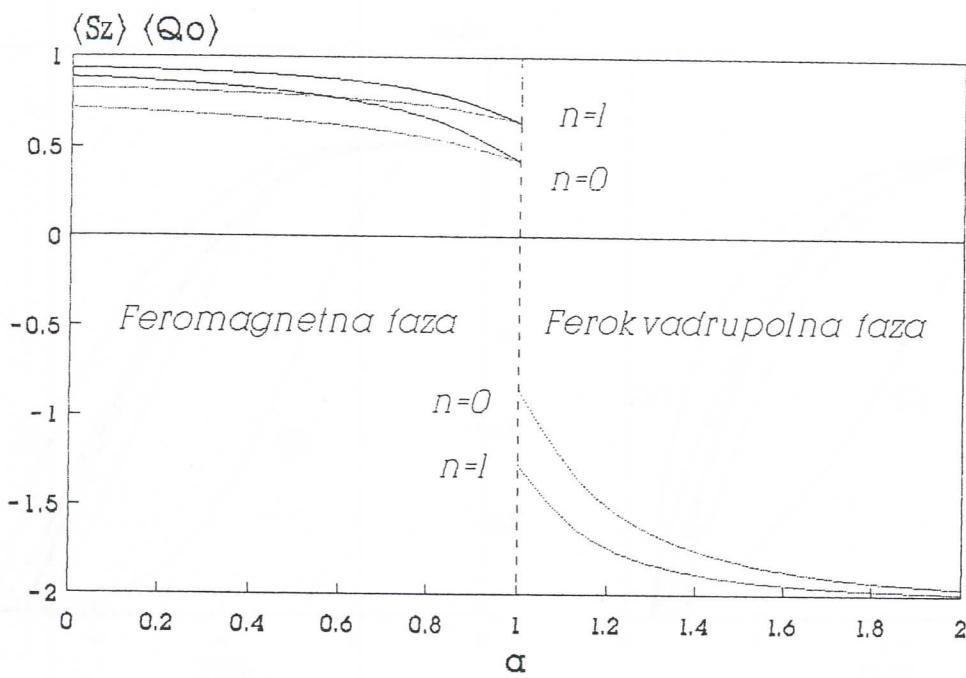
Sl.5.1 Vrednosti parametara uređenosti po slojevima filma u (a) feromagnetsnoj i (b) ferokvadrupolnoj fazi za različite vrednosti površinskih parametara: $\varepsilon = 3/4$ - tanka linija, $\varepsilon = 1$ - puna linija, $\varepsilon = 5/4$ - tačkasta linija i $\varepsilon = 3/2$ - isprekidana linija.



Sl.5.2 Uticaj površinskog parametra na magnetizaciju i kvadrupolni moment površinskih slojeva simetričnog filma ($N_z = 9$) na temperaturi $t = 2$. (a) Feromagnetna faza ($a = 0.25$) i (b) ferokvadrupolna faza ($a = 1.25$). (Puna linija - $n_z = 0$, tanka linija - $n_z = 1$ i tačkasta linija - $n_z = 2$.)

Detaljnija analiza uticaja površinskih parametara, slika 5.2, pokazuje da njihovo smanjenje može dovesti do drastične promene parametara uređenosti na površinskim slojevima filma. Tako na primer, pri $\epsilon = 0.1$, vrednost magnetizacije na površinskom sloju iznosi $\sim 10\%$ a kvadropulnog momenta $\sim 30\%$ balkovske vrednosti. Međutim, kod unutrašnjih slojeva filma taj uticaj je znatno manji i počev od trećeg sloja postaje zanemarljivo mali. Pri $\epsilon = 1.25$ dolazi do presecanja linija na slici jer u tom slučaju parametri uređenosti imaju iste vrednosti na svim slojevima filma. Dalje povećanje površinskog parametra ($\epsilon > 5/4$) nema tako izrazit uticaj na parametre uređenosti.

Pomoću jednačina srednjeg polja (5.13 – 14) numerički je ispitana i uticaj bikvadratne interakcije na parametre uređenosti. Rezultati ove analize, kod desetoslojnog filma ($N_z = 9$) sa slobodnim površinama ($\epsilon_0 = \epsilon_N = 1$) i na temperaturi $k_B T = 2$, prikazani su na slici 5.3. Sa slike se vidi da povećanje bikvadratne interakcije (a), u feromagnetnoj fazi, dovodi do smanjenja parametara uređenosti. Za $a = 1$, postoji dva degenerisana skupa rešenja kao i u slučaju masivnog feromagnetika sa bikvadratnom interakcijom [28]. Kod jednog skupa rešenja parametri uređenosti imaju iste vrednosti na pojedinim slojevima filma ($\sigma_n = q_n$) dok je kod drugog $\sigma_n = 0, q_n < 0$ na svakom sloju. Oba skupa rešenja imaju istu slobodnu energiju i koegzistiraju na svim temperaturama ispod kritične. Pri $a > 1$ sistem prelazi u ferokvadrupolnu fazu kada povećanje parametra bikvadratne interakcije dovodi do naglog smanjenja, a potom do saturacije srednjih kvadrupolnih momenata.



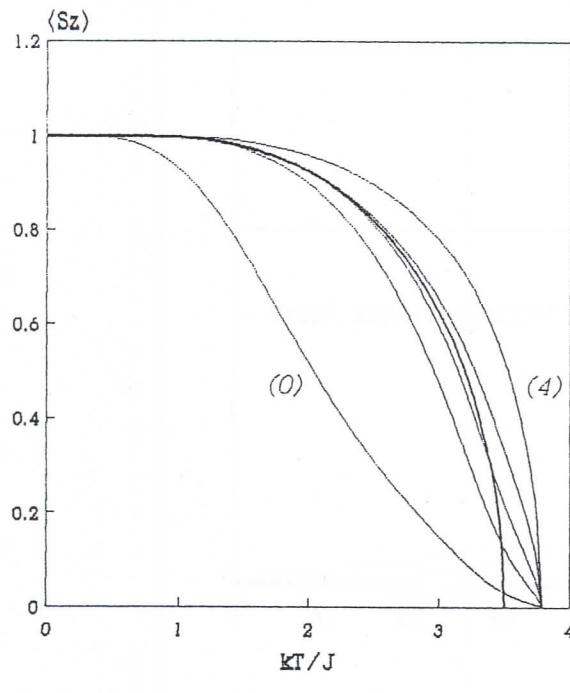
Sl.5.3 Uticaj bikvadratne interakcije na parametre uređenosti kod dva površinska sloja filma ($N_z = 9$) sa slobodnim površinama na temperaturi $t = 2$. (Puna linija - σ_n , tačkasta linija - q_n .)

Konačno, numerički je ispitana i temperaturska zavisnost parametara uređenosti za različite slojeve filma. Na slici 5.4, ova zavisnost je (radi preglednosti) prikazana kod petoslojnog filma sa asimetričnim graničnim uslovima ($\epsilon_0 = 0.5$, $\epsilon_N = 1.5$) i to u feromagnetskoj fazi ($a = 0.25$). Sa slike se vidi da parametri uređenosti na različitim slojevima filma mogu imati manje ili veće vrednosti od balkovskih što isključivo zavisi od graničnih uslova. Pored toga, na osnovu ovih rezultata se može zaključiti da za razliku od polubeskonačne⁹ strukture [123, 122], kod tankih filmova postoji jedinstvena temperatura faznog prelaza. Dobijene vrednosti kritičnih temperatura se dobro slažu sa analitičkom procenom (5.19).

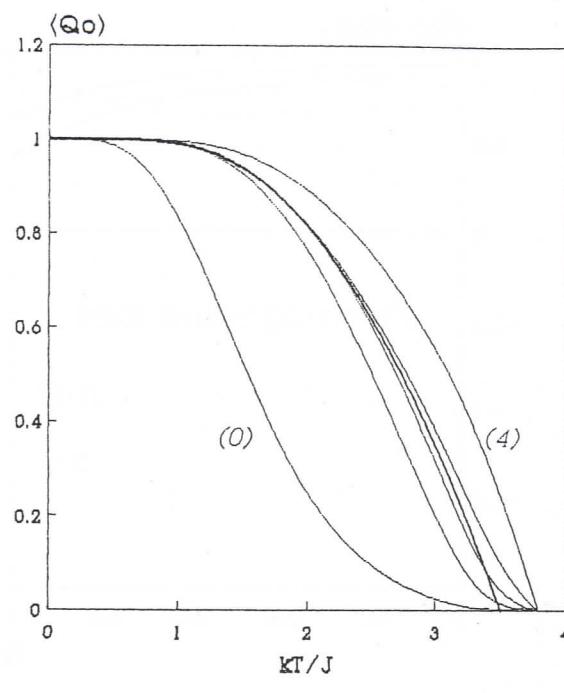
Na slici 5.5 prikazana je temperaturska zavisnost magnetizacije i kvadrupolnog momenta pod istim uslovima ali pri $a = 0.8$. Uticaj površinskih parametara je sličan prethodnom primeru. Međutim, u ovom slučaju parametri uređenosti naglo isčezavaju u blizini kritične temperature što ukazuje na promenu tipa faznih prelaza pri $a > 2/3$. Ovo pitanje ćemo posebno analizirati.

U ferokvadrupolnoj fazi se takođe javljaju fazni prelazi prve vrste što se može videti sa slike 5.6 na kojoj je prikazana temperaturska zavisnost kvadrupolnog momenta na slojevima filma pri $a = 1.25$. Ostali uslovi su isti kao na predhodne dve slike.

⁹ Kritična temperatura može imati različite vrednosti na površini i u zapremini.

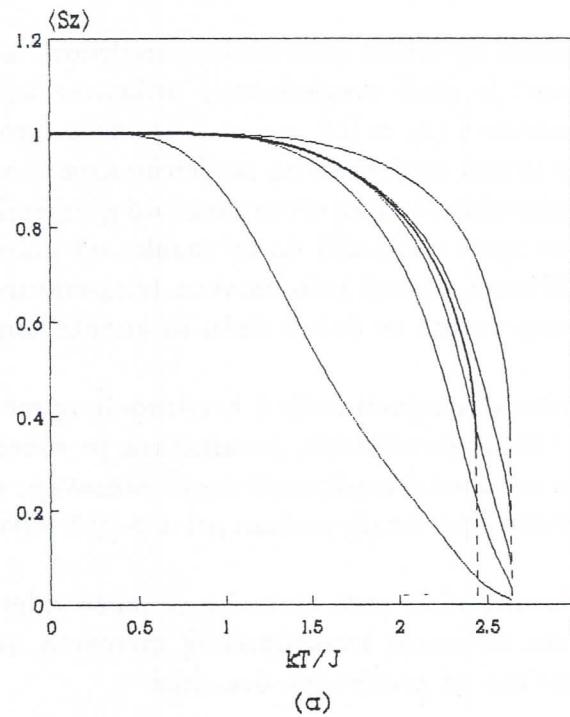


(a)

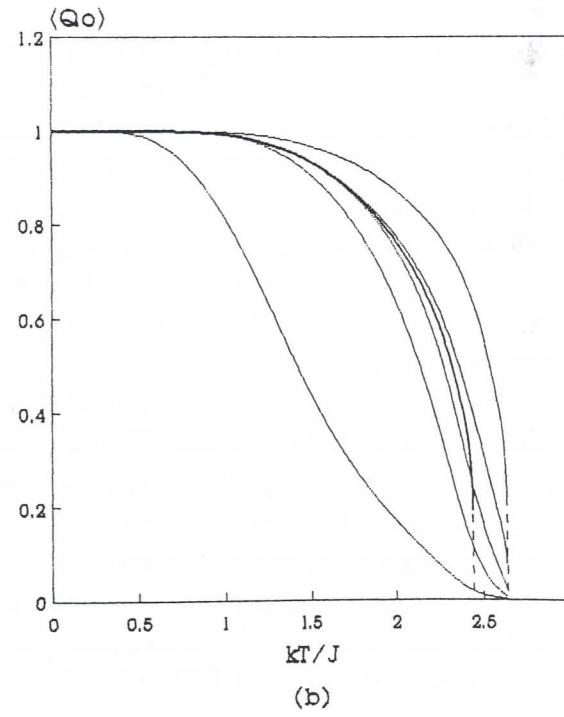


(b)

S1.5.4 Temperaturska zavisnost magnetizacije (a) i kvadrupolnog momenta (b) po slojevima filma ($N_z = 4$, $a = 0.25$, $\epsilon_0 = 0.5$, $\epsilon_N = 1.5$). Puna linija se odnosi na balk.

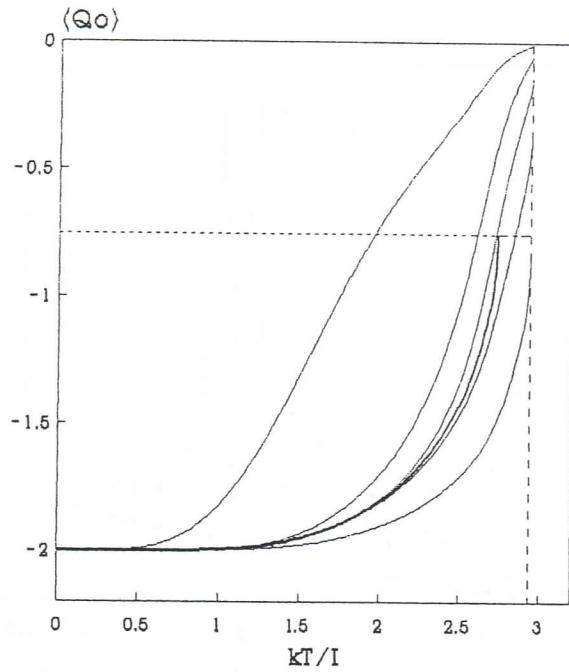


(a)



(b)

S1.5.5 Temperaturska zavisnost magnetizacije (a) i kvadrupolnog momenta (b) po slojevima filma pri $a = 0.8$. Ostali uslovi su kao na slici 5.4.



S1.5.6 Temperaturska zavisnost kvadrupolnog momenta po slojevima filma pri $a = 1.25$. Ostali uslovi su kao na slici 5.4.

5.3.3 Specifična toplota

Specifična toplota po elementarnoj ćeliji kod tankih feromagnetskih filmova sa bijkvadratnom interakcijom,

$$C = \frac{1}{N_x N_y (N_z + 1)} \frac{d\langle H_{MF} \rangle}{dT} = \frac{k_B}{2N_x N_y (N_z + 1) I} \frac{d\langle H_0 \rangle}{dt} \quad (5.24)$$

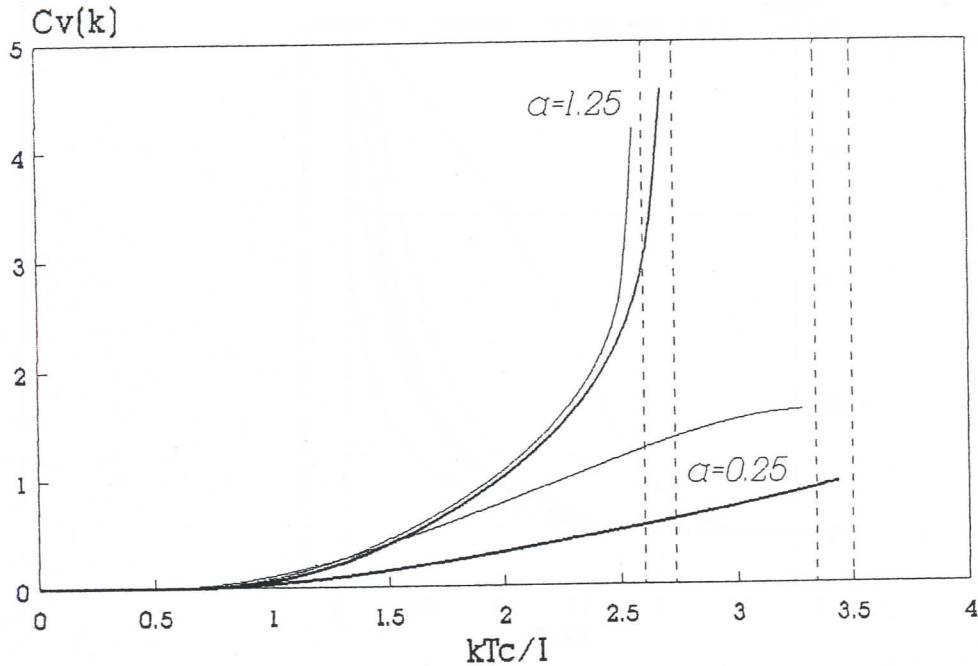
može se izračunati pomoću relacije (5.5) za unutrašnju energiju u aproksimaciji srednjeg polja. Međutim, izraz koji se na taj način dobija:

$$C = -\frac{k_B}{2(N_z + 1) I} \sum_{n=0}^N \left[\left(1 - \frac{a}{2}\right) \left(\frac{d\bar{\mathcal{H}}_n}{dt} \sigma_n + \bar{\mathcal{H}}_n \frac{d\sigma_n}{dt} \right) + \frac{a}{6} \left(\frac{d\bar{\mathcal{K}}_n}{dt} q_n + \bar{\mathcal{K}}_n \frac{dq_n}{dt} \right) \right] \quad (5.25)$$

ne može poslužiti za analitičko određivanje temperaturske zavisnosti specifične toplote. Pomoću jednačine (5.25) može se jedino zaključiti da na apsolutnoj nuli specifična toplota isčezava,

$$\lim_{T \rightarrow 0} C(T) = 0$$

pošto se na niskim temperaturama srednji dipolni i kvadrupolni momenti veoma sporo menjaju sa temperaturom ($\frac{d\sigma_n}{dt} = \frac{q_n}{dt} \approx 0$). Pored toga, jasno je da iznad kritične temperature tj. u paramagnetskoj fazi specifična toplota takođe isčezava.



Sl.5.7 Specifična toplota petoslojnog filma sa slobodnim površinama u feromagnetnoj ($a = 1/4$) i ferokvadrupolnoj fazi ($a = 5/4$). Pune linije se odnose na beskonačan feromagnetik.

U temperaturskom intervalu $0 < T < T_c$, specifična toplota se može izračunati jedino približno. Numerička analiza jednačine (5.25) urađena je pomoću programskog paketa *Mathematica* 386 [55] (kao i sve ostale kalkulacije u ovoj disertaciji). Najpre su, Njutnovim iteracionim postupkom, dobijena rešenja sistema nelinearnih jednačina (5.13-14) i tako formirane liste podataka za parametre uređenosti u čitavom temperaturskom intervalu. Interpolacija ovih podataka polinomima, omogućila je da se nakon numeričkog diferenciranja specifična toplota izračuna pomoću formule (5.25). Rezultati ovih proračuna za petoslojni film ($N_z = 4$) sa slobodnim površinama ($\epsilon_0 = \epsilon_N = 1$) prikazani su na slici 5.7. Sa slike se jasno vidi da je specifična toplota kod tankih filmova veća nego kod masivnih uzoraka što je svakako posledica kvazidiskretnе prirode magnonskog spektra. Može se pretpostaviti da će poseban doprinos u specifičnoj toploti dati površinski magnoni, međutim te analize nisu ovde urađene zbog obimnosti proračuna. Iz istog razloga ovde su izostale i analize „balkovskog limesa” tj. uticaja debljine filma na termomagnetsna svojstva.

Napomenimo da se gornji zaključak odnosi kako na feromagnetnu tako i na ferokvadrupolnu fazu. Razlika je jedino u tome što kod feromagnetne faze specifična toplota ima konačan diskontinuitet u kritičnoj tački dok u ferokvadrupolnoj fazi divergira. Takvo ponašanje specifične toplote pokazuje da su i kod tankih feromagnetsnih filmova sa bikvadratnom interakcijom mogući fazni prelazi I i II vrste [29].

5.4 Magnonski spektri

Jednačine srednjeg polja (5.13 – 14) za parametre uređenosti σ i q omogućavaju proračun magnonskog spektra na proizvoljnoj temperaturi $\Theta < \Theta_C$. Predmet analize u ovoj sekciji jeste uticaj bikvadratne interakcije i graničnih uslova na spektar elementarnih eksitacija tankih feromagnetskih filmova u različitim fazama i na različitim temperaturom. Posebna pažnja biće posvećena površinskim magnetnim modovima zbog velikog uticaja koji imaju na termomagnetska svojstva tankih filmova.

5.4.1 Zakon disperzije

Za razliku od fonona (Glava 3) i elektrona (Glava 4) gde je zakon disperzije dobiten metodom Grinovih funkcija, kod feromagnetskih filmova ćemo primeniti ekvivalentni „operatorski“ metod. Zakon disperzije za slučaj spina $S = 1$ može se dobiti i pomoću dva operatora, $B_{\vec{m}}^{(1)} = S_{\vec{m}}^+$ i $B_{\vec{m}}^{(2)} = S_{\vec{m}}^+ S_{\vec{m}}^z + S_{\vec{m}}^z S_{\vec{m}}^+$ koji zadovoljavaju kvantomehaničke jednačine kretanja:

$$i\hbar \frac{dB_{\vec{m}}^{(i)}}{dt} = [B_{\vec{m}}^{(i)}, H]_- \quad (i = 1, 2) \quad (5.26)$$

Potrebne komutatore u ovoj jednačini izračunaćemo pomoću hamiltonijana (5.1) napisanog u nešto drugačijem obliku:

$$\begin{aligned} H = & - \frac{1}{2} \sum_{\vec{i}, \vec{j}} I_{\vec{i}, \vec{j}} \left[\hat{S}_{\vec{i}}^+ \hat{S}_{\vec{j}}^- - (1 - \frac{a}{2}) \hat{S}_{\vec{i}}^z \hat{S}_{\vec{j}}^z \right] - \frac{a}{2} \sum_{\vec{i}, \vec{i}} I_{\vec{i}, \vec{i}} \left[\frac{3}{2} (\hat{S}_{\vec{i}}^+)^2 (\hat{S}_{\vec{i}}^z)^2 - \right. \\ & \left. - S(S+1) (\hat{S}_{\vec{i}}^z)^2 + \frac{1}{2} (\hat{S}_{\vec{i}}^+)^2 (\hat{S}_{\vec{j}}^-)^2 - \hat{S}_{\vec{i}}^+ \hat{S}_{\vec{i}}^z \hat{S}_{\vec{j}}^+ \hat{S}_{\vec{j}}^z + \hat{S}_{\vec{i}}^z \hat{S}_{\vec{i}}^+ \hat{S}_{\vec{j}}^z \hat{S}_{\vec{j}}^- \right] \end{aligned} \quad (5.27)$$

pri čemu je spoljašnje polje \mathcal{H} izostavljeno. Pomoću hamiltonijana (5.27) dobijaju se sledeće jednačine kretanja:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\hat{B}_{\vec{m}}^{(1)}}{dt} = & \left(1 - \frac{a}{2} \right) \sum_{\vec{i}} I_{\vec{i}, \vec{m}} \left(\hat{S}_{\vec{i}}^z \hat{B}_{\vec{m}}^{(1)} - \hat{S}_{\vec{m}}^z \hat{B}_{\vec{i}}^{(1)} \right) + \\ & + \frac{a}{2} \sum_{\vec{i}} I_{\vec{i}, \vec{m}} \left[\hat{Q}_{\vec{i}}^0 \hat{B}_{\vec{m}}^{(2)} - \hat{Q}_{\vec{m}}^0 \hat{B}_{\vec{m}}^{(2)} + (\hat{B}_{\vec{m}}^{(1)})^2 (\hat{S}_{\vec{m}}^- \hat{S}_{\vec{m}}^z + \hat{S}_{\vec{m}}^z \hat{S}_{\vec{m}}^-) - (\hat{B}_{\vec{m}}^{(1)})^2 (\hat{S}_{\vec{m}}^z \hat{S}_{\vec{m}}^- + \hat{S}_{\vec{m}}^- \hat{S}_{\vec{m}}^z) \right] \\ i\hbar \frac{d\hat{B}_{\vec{m}}^{(2)}}{dt} = & - \left(1 - \frac{a}{2} \right) \sum_{\vec{i}} I_{\vec{i}, \vec{m}} \left[\hat{B}_{\vec{m}}^{(1)} \hat{Q}_{\vec{m}}^0 - \hat{S}_{\vec{i}}^z \hat{B}_{\vec{m}}^{(2)} + (\hat{B}_{\vec{m}}^{(1)})^2 \hat{S}_{\vec{i}}^- \right] + \\ & + \frac{a}{2} \sum_{\vec{i}} I_{\vec{i}, \vec{m}} \left[\hat{Q}_{\vec{i}}^0 \hat{B}_{\vec{m}}^{(1)} - \hat{S}_{\vec{m}}^z \hat{B}_{\vec{i}}^{(2)} + (\hat{B}_{\vec{i}}^{(1)})^2 \hat{S}_{\vec{m}}^- \right] \end{aligned} \quad (5.28)$$

Jednačine (5.28) se mogu linearizovati na isti način kao jednačine (2.127).

Dobija se homogeni sistem linearnih kuplovanih jednačina za operatore $\hat{B}_{\vec{m}}^{(1)}$ i $\hat{B}_{\vec{m}}^{(2)}$:

$$\left[\hbar\omega - \left(1 - \frac{a}{2} \right) \sum_{\vec{i}} I_{\vec{m}, \vec{i}} \sigma_{\vec{i}} \right] \hat{B}_{\vec{m}}^{(1)} + \left(1 - \frac{a}{2} \right) \sigma_{\vec{m}} \sum_{\vec{i}} I_{\vec{m}, \vec{i}} \hat{B}_{\vec{m}}^{(1)} - \frac{a}{2} \sum_{\vec{i}} I_{\vec{m}, \vec{i}} q_{\vec{i}} \hat{B}_{\vec{m}}^{(2)} + \frac{a}{2} q_{\vec{m}} \sum_{\vec{i}} I_{\vec{m}, \vec{i}} \hat{B}_{\vec{m}}^{(2)} = 0 \quad (5.29)$$

$$\left(1 - \frac{a}{2} \right) q_{\vec{m}} \sum_{\vec{i}} I_{\vec{m}, \vec{i}} \hat{B}_{\vec{m}}^{(1)} - \frac{a}{2} \sum_{\vec{i}} I_{\vec{m}, \vec{i}} q_{\vec{i}} \hat{B}_{\vec{m}}^{(1)} + \left[\hbar\omega - \left(1 - \frac{a}{2} \right) \sum_{\vec{i}} I_{\vec{m}, \vec{i}} \sigma_{\vec{i}} \right] \hat{B}_{\vec{m}}^{(2)} + \frac{a}{2} \sigma_{\vec{m}} \sum_{\vec{i}} I_{\vec{m}, \vec{i}} \hat{B}_{\vec{m}}^{(2)} = 0$$

Konačno, dvodimenzione Furijeove transformacije operatora,

$$\hat{B}_{\vec{m}}^{(i)} = \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x, k_y} \hat{B}_m^{(i)} e^{ia_0(m_x k_x + m_y k_y)}, \quad (i = 1, 2; \quad m = 0, 1, \dots, N) \quad (5.30)$$

daju homogen sistem $2(N + 1)$ diferencnih jednačina:

$$\begin{aligned} n &= 0 \\ &[\mathcal{E} - h_0 + 2(2 - a)\epsilon_0 \sigma_0 Y(k_x, k_y)] \hat{B}_0^{(1)} - [3k_0 - 2a q_0 Y(k_x, k_y)] \hat{B}_0^{(2)} + \\ &+ 2(2 - a)\sigma_0 Y(k_x, k_y) \hat{B}_1^{(1)} + 2aq_0 Y(k_x, k_y) \hat{B}_1^{(2)} = 0 \\ &[-3k_0 + 2(2 - a)q_0 Y(k_x, k_y)] \hat{B}_0^{(1)} + [\mathcal{E} - h_0 + 2\sigma_0 Y(k_x, k_y)] \hat{B}_0^{(2)} + \\ &+ 2(2 - a)q_0 Y(k_x, k_y) \hat{B}_1^{(1)} + 2a\sigma_0 Y(k_x, k_y) \hat{B}_1^{(2)} = 0 \\ &1 \leq n \leq N - 1 \\ &[\mathcal{E} - h_n + 2(2 - a)\sigma_n Y(k_x, k_y)] \hat{B}_n^{(1)} - [3k_n - 2a q_n Y(k_x, k_y)] \hat{B}_n^{(2)} + \\ &+ 2(2 - a)\sigma_n Y(k_x, k_y) (\hat{B}_{n+1}^{(1)} + \hat{B}_{n-1}^{(1)}) + 2aq_n Y(k_x, k_y) (\hat{B}_{n+1}^{(2)} + \hat{B}_{n-1}^{(2)}) = 0 \\ &[-3k_n + 2(2 - a)q_n Y(k_x, k_y)] \hat{B}_n^{(1)} + [\mathcal{E} - h_n + 2a\sigma_n Y(k_x, k_y)] \hat{B}_n^{(2)} + \\ &+ 2(2 - a)q_n Y(k_x, k_y) (\hat{B}_{n+1}^{(1)} + \hat{B}_{n-1}^{(1)}) + 2a\sigma_n Y(k_x, k_y) (\hat{B}_{n+1}^{(2)} + \hat{B}_{n-1}^{(2)}) = 0 \\ &n = N \\ &[\mathcal{E} - h_N + 2(2 - a)\epsilon_N \sigma_N Y(k_x, k_y)] \hat{B}_N^{(1)} - [3k_N - 2a q_N Y(k_x, k_y)] \hat{B}_N^{(2)} + \\ &+ 2(2 - a)\sigma_N Y(k_x, k_y) \hat{B}_{N-1}^{(1)} + 2aq_N Y(k_x, k_y) \hat{B}_{N-1}^{(2)} = 0 \\ &[-3k_N + 2(2 - a)q_N Y(k_x, k_y)] \hat{B}_N^{(1)} + [\mathcal{E} - h_N + 2\sigma_N Y(k_x, k_y)] \hat{B}_N^{(2)} + \\ &+ 2(2 - a)q_N Y(k_x, k_y) \hat{B}_{N-1}^{(1)} + 2a\sigma_N Y(k_x, k_y) \hat{B}_{N-1}^{(2)} = 0 \end{aligned} \quad (5.31)$$

U sistem jednačina (5.31), energija elementarnih eksitacija $\mathcal{E} = \hbar\omega/I$ i srednja polja $h_n = \mathcal{H}_n/I$ i $k_n = \mathcal{K}_n/I$ ($n = 0, 1, \dots, N$), ulaze kao bezdimenzijsne veličine što je pogodno kod numeričkih izračunavanja. Determinanta ovog sistema predstavlja polinom stepena $2(N + 1)$ i može se predstaviti u obliku:

$$\mathcal{D}[\mathcal{E}(k_x, k_y), a, \varepsilon_0, \varepsilon_N] = \begin{vmatrix} B_0 & G_0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ G_1 & B_1 & G_1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & G_2 & B_2 & G_2 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & G_{N-2} & B_{N-2} & G_{N-2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & G_{N-1} & B_{N-1} & G_{N-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & G_N & B_N \end{vmatrix} \quad (5.32)$$

gde je:

$$B_n = \begin{vmatrix} \mathcal{E} - h_n + 2(2-a) Y_n(k_x, k_y) \sigma_n & -3k_n + 2aY_n(k_x, k_y) q_n \\ -3k_n + 2(2-a) Y_n(k_x, k_y) q_n & \mathcal{E} - h_n + 2aY_n(k_x, k_y) \sigma_n \end{vmatrix}$$

$$G_n = \begin{vmatrix} \left(1 - \frac{a}{2}\right) \sigma_n & \frac{a}{2} q_n \\ \left(1 - \frac{a}{2}\right) q_n & \frac{a}{2} \sigma_n \end{vmatrix} \quad Y_n(k_x, k_y) = \begin{cases} \varepsilon_n Y(k_x, k_y), & n = 0, N \\ Y(k_x, k_y), & 1 \leq n \leq N-1 \end{cases}$$

Pošto se radi o homogenom sistemu jednačina, jasno je da njegova determinanta mora biti jednak nuli što zapravo određuje zakon disperzije elementarnih pobuđenja na proizvoljnoj temperaturi,

$$\mathcal{D}[\mathcal{E}(k_x, k_y), a, \varepsilon_0, \varepsilon_N] = 0 \quad (5.33)$$

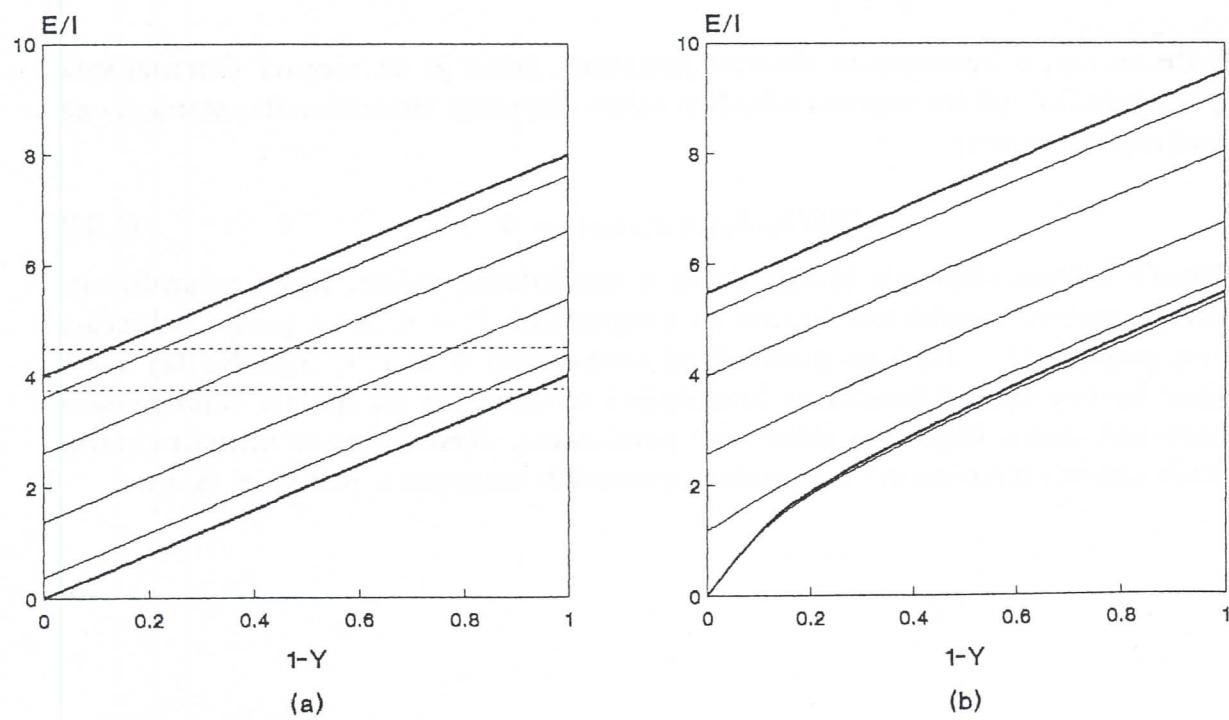
Pomoću zakona disperzije (5.33), datog u implicitnom obliku, mogu se analizirati magnonski spektri u različitim fazama na temperaturi $T = 0$, a uz pomoć jednačina srednjeg polja (5.13 – 14) i na proizvoljnoj temperaturi $0 < T < T_C$. Na taj način je najpre ispitana uticaj bikvadratne interakcije i temperature na spektar zapreminskega magnona kod tankih filmova sa slobodnim površinama. Nakon toga se razmatra uticaj graničnih uslova i temperature na spektar površinskih magnona u različitim fazama.

5.4.2 Zapreminske magnoni

Na osnovu zakona disperzije (5.33) i jednačina srednjeg polja (5.13 – 14) numerički je analiziran magnonski spekter petoslojnog filma ($N = 4$) sa slobodnim površinama ($\varepsilon_0 = \varepsilon_N = 1$). Rezultati su prikazani na slici 5.8(a) za feromagnetnu fazu i na slici 5.8(b) za ferokvadrupolnu fazu.

U feromagnetnoj fazi ($a = 0.25$) na $T = 0$, slika 5.8(a), jasno se uočavaju dimenzione podzone spektra (tanke linije) čiji je broj jednak broju slojeva filma. U ovom primeru najniža podzona se poklapa za donjom granicom balkovskog spektra. Sve podzone su akustičkog tipa i nalaze se unutar balkovskih granica (pune linije). To znači da su u feromagnetnoj fazi kod filma sa prostom kubnom strukturu i slobodnim površinama prisutni samo zapreminske magnoni. Pored zapreminskih eksitacija, u spektru se javljaju i dva dopunska nivoa energije (isprekidane linije) koji predstavljaju energije srednjih polja na površini i u zapremini filma. Ovi nivoi su degenerisani, stepen degeneracije „površinskog“ nivoa je 2, a „zapreminskog“ nivoa $N - 2$.

Na temperaturama iznad absolutne nule, dolazi do velikih promena u magnonskom spektru. Pre svega, povećanje temperature dovodi do opadanja energija a na kritičnoj temperaturi i do isčeđivanja, slično parametrima uređenosti. Pored toga, degeneracija dopunskih nivoa energije se gubi što je naročito izraženo u pojedinim delovima Briluenove zone. Time se broj podzona udvostručava ali se one istovremeno grupišu u dve grane. Broj podzona u pojedinim granama zavisi od parametra a . Sa njegovim povećanjem dolazi do „prelivanja“ podzona iz donje u gornju granu. Za $a = 2/3$ broj podzona je isti u obe grane.



Sl.5.8 Magnonski spektri kod petoslojnog filma sa slobodnim površinama na $T = 0K$.
(a) Feromagnetna faza i (b) ferokvadrupolna faza.

U ferokvadrupolnoj fazi ($a = 1.25$) na $T = 0K$, slika 5.8(b), dolazi do povećanja energija svih dimenzionih podzona. U spektru nema dopunskih nivoa jer je energija srednjeg polja dipolnih momenata jednaka nuli. Najniža podzona u jednom delu spektra ide ispod donje balkovske granice. Kao što ćemo videti, ova stanja su lokalizovana na graničnim površinama filma. Prema tome, u ferokvadrupolnoj fazi se pored zapreminskih javljaju i površinski magnoni čak i u slučaju proste kubne strukture sa slobodnim površinama. Treba napomenuti da se u ferokvadrupolnoj fazi simetrično pojavljuju i podzone sa negativnim energijama ali se one ne mogu pobuditi pa su ovde izostavljene.

Na temperaturama iznad absolutne nule, dolazi do opadanja energija slično feromagnetroj fazi. Posebno obeležje spektru u ovom slučaju daju dva lokalizovana stanja koja su sada prisutna u većem delu Briluenove zone. Ova stanja su predmet analize u sledećoj podsekciji.

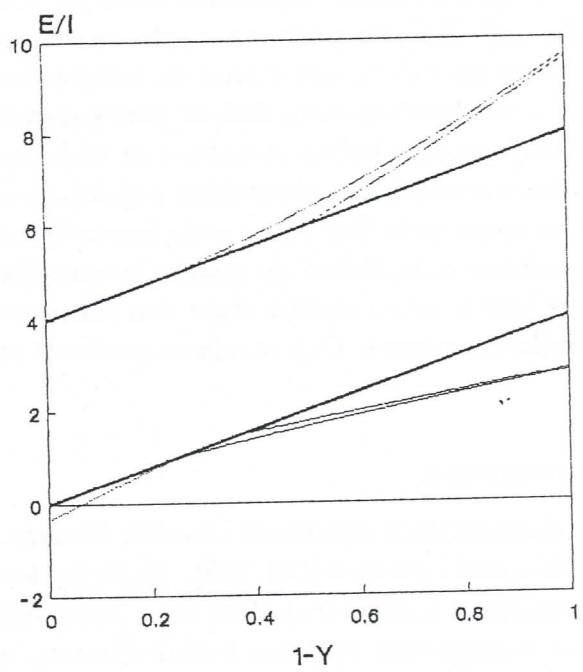
5.4.3 Spektar površinskih magnona

U magnonskom spektru polubeskonačnih struktura i tankih filmova mogu se, pored zapreminskih, pojaviti i površinski spinski modovi [121, 122]. Na to je ukazala i prethodna analiza spektra zapreminskih magnona u ferokvadrupolnoj fazi. Zbog velikog uticaja koji površinski magnoni imaju na termomagnetna svojstva tankih filmova, ovde će posebno biti ispitani uslovi egzistencije kao i uticaj graničnih uslova, bikvadratne interakcije i temperature na njihove spektre.

Iz analize spektara površinskih eksitacija u prethodne dve glave, poznato je da površinske podzone spektra imaju energije izvan balkovskih granica. U slučaju magnetnih filmova, slika 9, površinski magnoni leže iznad balkovske zone ukoliko je interakcija izmene veća na graničnim površinama nego u zapremini, bez obzira na bikvadratnu interakciju i temperaturu. Drugim rečima, na svakoj temperaturi uticaj parametra a na ove tzv. optičke magnone zanemarljivo je mali što je specifično za slučaj spina $S = 1$. Na slici 9 su prikazani i akustički magnoni koji leže ispod balkovske zone. Oni se pojavljuju u slučaju slabije interakcije izmene na graničnim površinama filma. Treba napomenuti da se kod ekstremno tankih filmova (na slici je $N = 4$) javljaju dve bliske podzone površinskih magnona. Kod debljih filmova ($N \geq 10$) dobija se jedna površinska podzona koja je degenerisana.

Detaljnog numeričkom analizom spektra površinskih magnona utvrđeno je i sledeće:

- Optički magnoni se javljaju na krajevima Briluenove zone ukoliko je $\epsilon > 1.4$. Za $\epsilon > 1.75$, optički magnoni se mogu pobuditi u čitavoj Briluenovoj zoni.
- Akustički magnoni se takođe javljaju najpre na krajevima zone pri $\epsilon < 1$ i nikada nisu prisutni u čitavoj zoni (pri $Y < 0.25$).



Sl.5.9 Spektar površinskih magnona na $T = 0K$ kod petoslojnog filma pri $a = 0.25$.
Pune linije predstavljaju balkovske granice, tanke linije $\epsilon = 0.5$ a isprekidane linije $\epsilon = 2$.

5.5 Analiza faznih prelaza

Prethodna razmatranja termomagnetskih svojstava su ukazala da se kod tankih filmova mogu pojaviti različiti tipovi uređenja (feromagnetno i ferokvadrupolno) i različiti tipovi faznih prelaza (I i II vrste) kao i trikritična tačka. Pitanje faznih prelaza kod tankih filmova, ovde ćemo razmotriti najpre analitički a zatim i numerički.

Zbog kompleksnog oblika sistema jednačina (5.13 – 14), njegova rešenja su određena numerički u čitavom temperaturskom intervalu $0 \leq T \leq T_C$. Analitička rešenja se mogu naći samo u blizini faznog prelaza. Linearizacija (5.15) jednačine (5.13) pokazuje da u blizini svake temperature $\Theta \simeq \Theta_C$ važe relacije:

$$S_n = \beta \sigma_n, \quad \forall n = 0, 1, \dots, N \quad (5.34)$$

gde je $\beta \equiv 4 + \rho_\nu$ a uvedene su i sledeće oznake:

$$\begin{aligned} S_n &= 4\sigma_n + \sigma_{n+1} + \sigma_{n-1}; & Q_n &= 4q_n + q_{n+1} + q_{n-1}; & n &\neq 0, N \\ S_0 &= 4\epsilon_0 \sigma_0 + \sigma_1; & Q_0 &= 4\epsilon_0 q_0 + q_1 \\ S_N &= 4\epsilon_N \sigma_N + \sigma_{N-1}; & Q_N &= 4\epsilon_N q_N + q_{N-1} \end{aligned} \quad (5.35)$$

Da bi odredili moguće tipove uređenja i moguće tipove faznih prelaza, jednačine (5.13) i (5.14) moramo razviti do članova reda σ^2 koristeći relaciju (5.34). Prvi korak je da se Q_n izrazi preko σ_n^2 . Iz (5.14) sledi da je:

$$q_n \approx \frac{1}{\alpha\beta} Q_n + \frac{3}{4\beta^2} S_n^2 \quad (5.36)$$

gde je $\alpha = (2 - a)/a$. Koristeći relacije (5.35) za Q_n i (5.36), dobijamo sistem jednačina koji izražava Q_n preko S_n^2 (tj. $(\beta\sigma_n)^2$). Ovaj sistem se može napisati u matričnom obliku:

$$\hat{\Delta}_N(x) \vec{Q} = \frac{3x}{4} \hat{A} \vec{\sigma}^2 \quad (5.37)$$

gde je

$$\hat{\Delta}_N(x) = x \hat{I}_N - \hat{A}_N \quad (5.38)$$

$$\vec{\sigma}^2 = \begin{pmatrix} \sigma_0^2 \\ \sigma_1^2 \\ \vdots \\ \vdots \\ \sigma_N^2 \end{pmatrix}; \quad \vec{Q} = \begin{pmatrix} Q_0 \\ Q_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ Q_N \end{pmatrix}; \quad x \equiv \alpha \beta \quad (5.39)$$

Ovde je neophodan važan komentar. Matrice $\hat{\Delta}_N(x)$ i $\hat{D}_N(\beta)$ imaju sličan oblik, tako da su i njihove determinante sličnog oblika: $D_N = \prod_\nu (\beta - \beta_\nu)$; $\Delta_N = \prod_\nu (x - \beta_\nu)$, gde su β_ν rešenja jednačine $D_N = 0$.

Relacija (5.37) omogućava da se odredi kada sistem prelazi u ferokvadrupolno uređenje. Kada Δ_N isčezava, σ takođe isčezava, u suprotnom Q divergira.

Razvojem u (5.13) do članova σ_n^3 i koristeći (5.19) i (5.36), dobijamo

$$\frac{9}{8} \sigma_n^2 - \frac{3}{2x} Q_n = 3 \left(\frac{\beta_\nu}{\beta} - 1 \right) \quad (5.40)$$

ili u matričnoj formi:

$$\frac{3}{4} \hat{I}_N \vec{\sigma}^2 - \frac{1}{x} \hat{I}_N \vec{Q} = 2 \left(\frac{\beta_\nu}{\beta} - 1 \right) \vec{1}_N \quad (5.41)$$

gde je \hat{I}_N jedinična matrica dok je $\vec{1}$ matrica kolone sa svim elementima jednakim 1. Iz jednačine (5.36) sledi:

$$\vec{Q} = \frac{3x}{4} \hat{\Delta}_N^{-1} \hat{A} \vec{\sigma}^2 \quad (5.42)$$

Kombinujući (5.41) sa (5.42) dobijamo:

$$\hat{\Delta}_0^{(N)} \vec{\sigma}^2 = \frac{8}{3\beta} (\beta_\nu - \beta) \hat{\Delta}_N \vec{1}_N \quad (5.43)$$

gde smo uveli

$$\hat{\Delta}_0^{(N)} = \hat{\Delta}_N - \hat{A} = x \hat{I}_N - 2 \hat{A} \quad (5.44)$$

Uslov za pojavu trikritične tačke je:

$$\det |\hat{\Delta}_0^{(N)}| \equiv \Delta_0^{(N)} = 0 \quad (5.45)$$

jer se u tom slučaju ne može odrediti $\sigma_n^2 = f(\Theta_C - \Theta)$. U najopštijem slučaju, pošto jednačina $\Delta_N(x) = 0$ ima rešenja: $x_\nu = \beta_\nu$ ($\nu = 1, 2, \dots, N+1$), tj. ako je

$$\Delta_N(\beta_\nu) = |\beta_\nu \hat{I}_N - \hat{A}_N| = 0 \quad (5.46)$$

tada je i $\Delta_0^{(N)}(x = 2\beta_\nu) = 0$. To se može lako pokazati pošto je

$$\Delta_0^{(N)}(2\beta_\nu) = |2\beta_\nu \hat{I}_N - 2\hat{A}| = 2^N |\beta_\nu \hat{I}_N - \hat{A}| = 2^N \Delta_N(\beta_\nu) = 0 \quad (5.47)$$

tj.

$$\Delta_0^{(N)}(2\beta_\nu) = 2^N \Delta_N(\beta_\nu) \equiv 0 \quad (5.48)$$

To znači da relacija

$$\Delta_N(x) = \prod_{\nu=1}^{N+1} (x - \beta_\nu)$$

implicira relaciju

$$\Delta_0^{(N)}(x) = \prod_{\nu=1}^{N+1} (x - 2\beta_\nu)$$

Formalno, može se zaključiti da se za svaku fazu Φ^μ , koja je određena svojim skupom $2(N+1)$ parametara $(\sigma_0^\mu, \sigma_1^\mu, \dots, \sigma_N^\mu)$ i $(q_0^\mu, q_1^\mu, \dots, q_N^\mu)$, pojavljuje $N+1$ trikritičnih tačaka u (β, α) ravni: $(\beta_\mu, \alpha_\mu^\nu \equiv \frac{2\beta_\nu}{\beta_\mu})$. Ako uvedemo notaciju $\beta_1 > \beta_2 > \dots$ gde $\beta_1 = \frac{3\Theta_C^1}{(2-a)\bar{I}}$ odgovara prelaznoj tački stabilne faze (koja je definisana u intervalu $0 \leq \Theta < \Theta_C^1$), tada se pojavljuje maksimalna vrednost parametra α : $\alpha_\mu^1 = \frac{2\beta_1}{\beta_\mu}$ koja dovodi do najviše

vrednosti za trikritičnu tačku date faze. To znači da se pri opadanju α , do faznog prelaza dolazi u toj tački, tako da su sve niže vrednosti α irrelevantne. Pošto nas uglavnom interesuje stabilna faza koja odgovara β_1 , vidimo da se trikritična tačka javlja za $\alpha = 2$.

Razmotrimo na kraju ove analize izraz za slobodnu energiju bilo koje faze Φ_ν u blizini kritične temperature β_ν . Razvojem slobodne energije u okolini Θ_C^ν po $\{\sigma_n\}$ do članova σ^4 :

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_N &= \mathcal{F}_N(0) + \sum_{n=1}^{N+1} \left[\left(\frac{\sigma_n}{2} - \frac{(2-a)I}{6\Theta} S_n \right) \frac{(2-a)I}{2} S_n + \left(\frac{q_n}{2} - \frac{aI}{6\Theta} Q_n \right) \frac{aI}{6} Q_n \right. \\ &\quad \left. + \frac{(2-a)^4 I^4}{36 \cdot 2^4 \Theta^3} S_n^4 - \frac{1}{3\Theta^2} \frac{Ia}{6} Q_n S_n^2 + O(\sigma^4) \right] \end{aligned} \quad (5.49)$$

i koristeći

$$q_n - \frac{Ia}{3\Theta} Q_n \approx \frac{(2-a)^2 I^2}{12 \Theta^2} S_n^2 = \frac{3}{4\beta^2} S_n^2$$

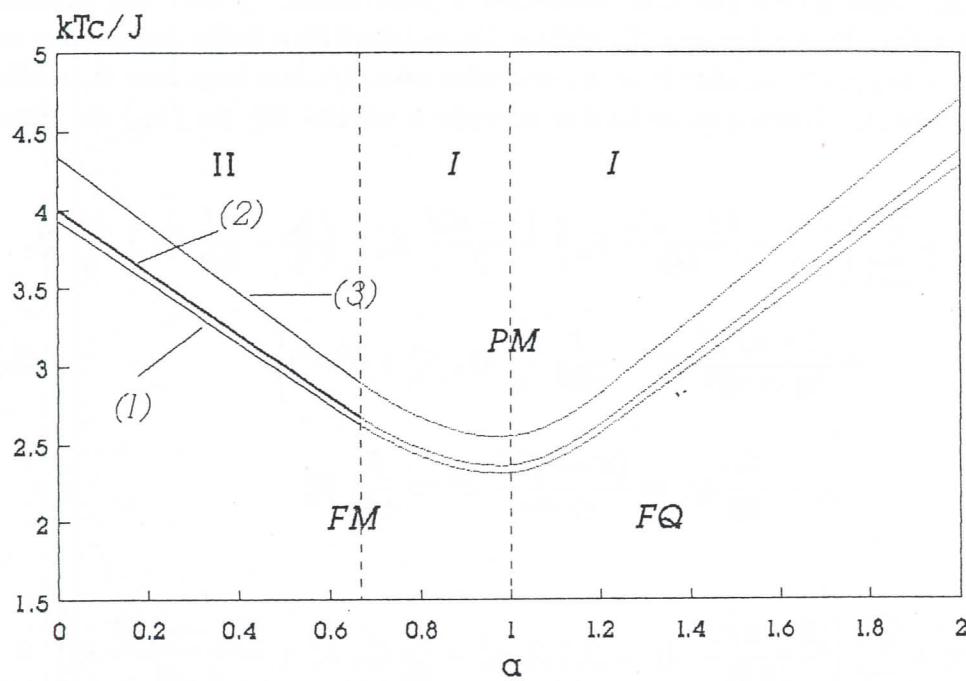
dobijamo

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_N &= \mathcal{F}_N(0) + \sum_{n=1}^{N+1} \left[\frac{(2-a)^2 I^2}{12 \Theta} (\beta - \beta_\nu) \beta_\nu \sigma_n^2 - \frac{aI}{4^2} Q_n \sigma_n^2 + \frac{3(2-a)I\beta}{4 \cdot 4^2} \sigma_n^4 \right] = \\ &= \mathcal{F}_N(0) + \sum_{n=1}^{N+1} \left[\frac{(2-a)I}{4} (\beta - \beta_\nu) \sigma_n^2 + \frac{aI}{4^2} \sigma_n^2 \left(\frac{3\alpha\beta}{4} \sigma_n^2 - Q_n \right) \right] \end{aligned} \quad (5.50)$$

tako da je ukupna slobodna energija u okolini $\Theta \simeq \Theta_C^\nu$, za fazu Φ^ν :

$$\mathcal{F}_N = \mathcal{F}_N(0) - \frac{(2-a)I}{8} (\beta_\nu - \beta) \sum_{n=1}^N \sigma_n^2 < \mathcal{F}_N(1) \quad (5.51)$$

Iz dobijenog izraza se vidi da je slobodna energija koja odgovara fazi sa najvišom prelaznom tačkom (Θ_C^1) najniža sve dok je temperatura $\Theta \leq \Theta_C^1$. Napomenimo da je ovu vrednost slobodne energije veoma teško uporediti sa slobodnom energijom koja odgovara nekoj fazi sa nižom prelaznom tačkom ($\Theta_C^\nu < \Theta_C^1$). Međutim, sve numeričke analize ukazuju da je ona najniža zbog čega smo i predpostavili da je ova faza jedina stabilna faza. Konačno, treba napomenuti da razvoj (5.51) ima smisla samo za $a < 2/3$, tj. za fazne prelaze II vrste. Za analitičko razmatranje faznih prelaza I vrste ($a > 2/3$) potreban je razvoj do članova višeg reda od σ . Ta oblast parametra a ovde se razmatra jedino numerički.



S1.5.10 Fazni dijagram desetoslojnog filma ($N = 9$) sa simetričnim granicama: (1) – $\epsilon = 0.25$, (2) – bulk , (3) – $\epsilon = 1.5$.

Numerička analiza faznih prelaza se zasniva na približnom rešavanju sistema nelinearnih jednačina (5.13 – 14) uz uslov da je slobodna energija minimalna. Dobijeni rezultati potvrđuju glavne zaključke koji se odnose na karakter uređenih faza i tačke faznih prelaza. Svi numerički rezultati su sumirani na faznom dijagramu, slika 5.10, gde je kritična temperatura kT_c/I prikazana u funkciji parametra bikvadratne interakcije (α) za različite vrednosti površinskog parametra (ϵ) kod simetričnog filma od deset ($N = 9$) slojeva. Trikritična tačka odgovara vrednosti $\alpha = 2/3$ dok trojna tačka, odnosno prelaz iz feromagnetne u ferokvadrupolnu fazu odgovara vrednosti $\alpha = 1$. Granični uslovi na površinama filma ne utiču na karakter uređenja i faznih prelaza već jedino na vrednost kritične temperature.

*After all, the perfect computation simply reproduces Nature,
it does not explain her.*
P.W.Anderson

6 ZAKLJUČAK

U disertaciji je dobijen niz rezultata koji bi se mogli klasifikovati na sledeći način.

1. Fononske spektre u filmovima karakteriše neophodnost aktivacione energije koja je utoliko veća ukoliko je debljina filma manja. Ovaj zaključak je značajan i za unapređenje superprovodnih karakteristika filmova i za pokušaj njihove primene u tehnici akustične izolacije. Pojava gepa u spektru mehaničkih oscilacija tankih filmova ispitana je i analitički i numerički za niz struktura različite debljine. Određeni su srednji kvadrati pomeraja i srednji kvadrati brzina atoma. Takođe su ispitivane termodynamičke karakteristike, kao što su unutrašnja energija i specifična toplota. Došlo se do zaključka da je na veoma niskim temperaturama specifična toplota filma manja od specifične toplote odgovarajuće masivne strukture. Posle toga, u jednom intervalu temperatura film ima višu specifičnu toplotu, a zatim ova pada ispod specifične toplote masivne strukture.
2. Najopsežnija istraživanja odnose se na elektronski podsistem tankih filmova, pošto je ovaj podsistem, izgleda, najosetljiviji na promene debljine strukture i na promene graničnih uslova. Ispitani su energetski spektri elektrona u tankim filmovima. Pokazano je da i u harmonijskoj aproksimaciji, elektroni mogu da imaju gep u spektru koji se može menjati promenom graničnih uslova. Analizirana je prostorna raspodela elektrona u zavisnosti od graničnih uslova. Nalaženje ove zavisnosti može biti od značaja za praktičnu primenu filmova jer se granični uslovi mogu veštački realizovati, i to tako, da stvore željenu prostornu distribuciju. Dosta prostora je posvećeno izračunavanju Fermi energije i gustine stanja. Računate su unutrašnja energija i specifična toplota elektronskog podsistema. Data je teorija zavisnosti Fermi energije, specifične toplote i veličine superkonduktivnog gepa od debljine filma. Ova zavisnost je oscilatornog karaktera i teorijski rezultati su se vrlo dobro uklopili u postojeća eksperimentalna istraživanja ovog efekta. Neophodan uslov za oscilovanje navedenih veličina je koncentracija elektrona manja od jedinične. Ovako male koncentracije se pojavljaju kod polumetala i poluprovodnika.

3. Eksperimentalna istraživanja feromagnetnih materijala pokazala su da Hajzenbergov model predstavlja suviše uprošćenu šemu koja ne može da obuhvati finije detalje magnetnih pojava. Prema Hajzenbergovom modelu feromagnet ima jedan parametar uređenosti. Postoji, međutim, čitav niz feromagneta sa dva parametra uređenosti. Pojava dopunskog parametra uređenosti odgovara dipol-kvadrupolnim i kvadrupol-kvadrupolnim interakcijama magnetnih momenata. U disertaciji je ispitivan feromagnet kod koga su pomenute interakcije uključene u Hajzenbergov hamiltonijan. Ispitivanja su vršena samo za tanak film i rezultati su upoređeni sa odgovarajućim rezultatima za masivnu i polubeskonačnu strukturu. Računati su parametri uređenosti i njihova zavisnost od graničnih uslova i temperature. Ispostavilo se da i kod filmova, kao i kod masivnih struktura, postoje dva tipa faznih prelaza čije kritične temperature zavise od konstante bikvadratne interakcije, debljine filma i graničnih uslova. Ove kritične temperature mogu da budu i više i niže od masivne strukture, a ovim se može dirigovati promenom graničnih uslova. Što se tiče magnonskih spektara oni su u odnosu na do sada poznate rade uopšteni na taj način što je nađena njihova zavisnost od temperature.

Rezimirajući rezultate koji su dobijeni moglo bi se reći da tanki filmovi predstavljaju bogato polje istraživanja koje u sebi krije niz korisnih i interesantnih efekata. Ovde je naročito značajna oštra zavisnost fizičkih parametara od graničnih uslova. Pošto je tehnika obrade i izrade filmova veoma napredovala, granični uslovi se mogu relativno lako menjati i time dirigovati fizičkim ponašanjem tankih filmova. Svoja buduća istraživanja bih skoncentrisao na detaljnije proučavanje uticaja graničnih uslova na karakteristike filmova. Ovo bi se pre svega odnosilo na optičke i transportne osobine kristalnih filmova poluprovodnih materijala.

A DODATAK

A.1 Karakteristični polinomi

Ovde ćemo detaljno analizirati karakteristične (Wolstenholme-ove) determinante [125] koje odgovaraju različitim vrednostima, $n = 0, 1, 2, \dots, N$

$$\mathcal{C}_n(x) = \begin{vmatrix} x & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & x & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & x & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & \ddots & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & x & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & x & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & x \end{vmatrix}_{nxn} \quad (\text{A.1})$$

Polazeći od (A.1) i pretpostavljajući početne uslove,

$$\mathcal{C}_0(x) = 1 ; \quad \mathcal{C}_1(x) = x \quad (\text{A.2})$$

može se pokazati da determinante $\mathcal{C}_n(x)$ zadovoljavaju rekurentnu relaciju [126]:

$$\mathcal{C}_{n+1}(x) = x\mathcal{C}_n(x) - \mathcal{C}_{n-1}(x) \quad (\text{A.3})$$

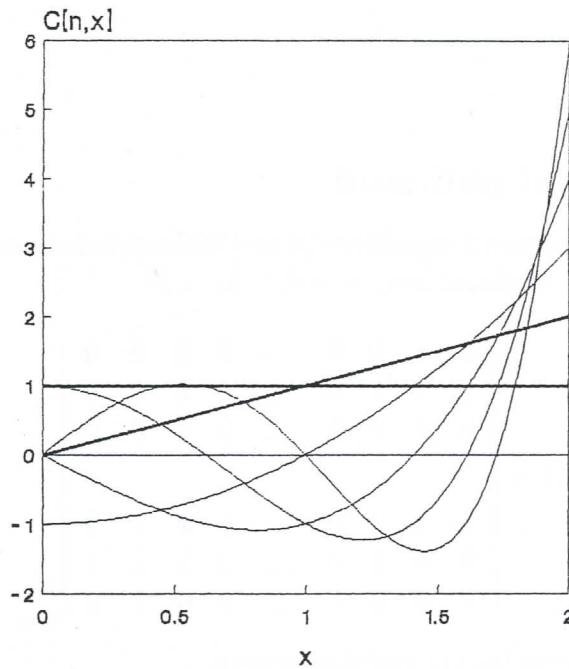
Sličnu relaciju zadovoljavaju i Čebiševljevi polinomi prve i druge vrste [127]

$$T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x)$$

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

Rekurentne relacije (A.3) i početni uslovi (A.2) mogu poslužiti za obrazovanje polinoma $\mathcal{C}_n(x)$. Navodimo prvih deset koji se koriste u većini proračuna. Neki od ovih polinoma su prikazani na Sl.A.1.

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



Sl.A1.1 Polinomi tipa Čebiševa za $n = 0, 1, 2, 3, 4$ i 5 .

Da bi našli opšti oblik polinoma $C_n(x)$, treba uočiti da rekurentna relacija (A.3) predstavlja homogenu diferencnu jednačinu drugog reda sa konstantnim koeficijentima za svako x . Rešenja takvih jednačina [128] su oblika

$$C_n(x) = r^n \quad (\text{A.5})$$

gde je r - pogodno odabrana konstanta različita od nule. Zamenom probnog rešenja (A.5) u (A.3), dobija se karakteristična jednačina diferencne jednačine,

$$r^2 - xr + 1 = 0 \quad (\text{A.6})$$

čiji su korenji

$$r_{1/2} = \frac{1}{2}(x \pm \sqrt{x^2 - 4}) \quad (\text{A.7})$$

U zavisnosti od varijable x , mogu se razlikovati tri slučaja.

a) Za $x > 2$, korenji (A.7) su realni i različiti pa je opšte rešenje jednačine (A.3) oblika,

$$C_x(x) = Ar_1^n + Br_2^n \quad (\text{A.8})$$

gde su A i B - proizvoljne konstante koje se mogu odrediti iz početnih uslova (A.2),

$$A = \frac{x - r_2}{r_1 - r_2}; \quad B = \frac{r_1 - x}{r_1 - r_2} \quad (\text{A.9})$$

Na taj način rešenje (A.8) postaje

$$\mathcal{C}_n(x) = \frac{2^{-(n+1)}}{\sqrt{x^2 - 4}} \left[(x + \sqrt{x^2 - 4})^{n+1} - (x - \sqrt{x^2 - 4})^{n+1} \right], x > 2 \quad (\text{A.10})$$

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

$$\mathcal{C}_n(x) = Ar_1^n + Br_1^n \quad (\text{A.11})$$

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

$$\mathcal{C}_n(x) = 1 + n, ; x = 2 \quad (\text{A.12})$$

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

$$r_{1/2} = \frac{1}{2}(x \pm i\sqrt{4 - x^2}) \quad (\text{A.13})$$

koji se mogu napisati u obliku

$$r_{1/2} = \cos \theta \pm i \sin \theta \quad (\text{A.14})$$

gde je,

$$x = 2 \cos \theta \quad (\text{A.15})$$

Rešenje diferencne jednačine, i u ovom slučaju, ima oblik (A.8) pri čemu je,

$$A = \frac{\cos \theta + i \sin \theta}{2i \sin \theta}; \quad B = -\frac{\cos \theta - i \sin \theta}{2i \sin \theta} \quad (\text{A.16})$$

Uvrštavajući (A.15) u (A.8), nakon neznatnog sređivanja uz pomoć Moavrovog obrašca, dobijamo:

$$\mathcal{C}_n(x) = \frac{\sin(n+1)\theta}{\sin \theta}; \quad x = 2 \cos \theta, \quad x \in (-2, 2) \quad (\text{A.17})$$

Ovo rešenje omogućava analitičko određivanje energija elementarnih ekscitacija kod tzv. „idealnih“ filmova.

Eksplizitni oblik (A.16) polinoma $\mathcal{C}_n(x)$ omogućava da se dokaže njihova ortogonalnost. Polazeći od poznate formule,

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

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

$$\int_{-2}^2 \frac{1}{4} \sqrt{4 - x^2} \mathcal{C}_n(x) \mathcal{C}_m(x) dx = \frac{\pi}{2} \delta_{nm} \quad (\text{A.18})$$

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

Pored toga, ako relaciju (A.16) napišemo u obliku,

$$\mathcal{C}_n(x) = \frac{\sin[(n+1)\arccos(x/2)]}{\sqrt{1-x^2/4}} \quad (\text{A.19})$$

tada, nakon diferenciranja dobijamo:

$$\frac{d}{dx}\mathcal{C}_n(x) = \frac{x \sin[(n+1)\arccos(x/2)]}{4(1-x^2/4)^{3/2}} - \frac{n+1}{2} \frac{\cos[(n+1)\arccos(x/2)]}{1-x^2/4} \quad (\text{A.20})$$

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dx^2}\mathcal{C}_n(x) &= \frac{3}{16}x^2 \frac{\sin[(n+1)\arccos(x/2)]}{(1-x^2/4)^{5/2}} - \\ &- \frac{3}{8}(n+1)x \frac{\cos[(n+1)\arccos(x/2)]}{(1-x^2/4)^2} - \\ &- \frac{1}{4}n(n+2) \frac{\sin[(n+1)\arccos(x/2)]}{(1-x^2/4)^{3/2}} \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

Kada u poslednjoj jednačini eliminišemo dva člana: $\cos[(n+1)\arccos(x/2)]$ i $\sin[(n+1)\arccos(x/2)]$ pomoću (A.19) i (A.20), sledi:

$$(4-x^2)\frac{d^2}{dx^2}\mathcal{C}_n(x) - 3x\frac{d}{dx}\mathcal{C}_n(x) + n(n+2)\mathcal{C}_n(x) = 0 \quad (\text{A.22})$$

Jedno partikularno rešenje ove diferencijalne jednačine su polinomi, (A.16) a drugo,

$$D_n(x) = \frac{\cos[(n+1)\arccos(x/2)]}{\sin[\arccos(x/2)]} \quad (\text{A.23})$$

Na kraju napomenimo da se polinomi $\mathcal{C}_n(x)$ mogu izračunati i kao koeficijenti u razvoju funkcije generatrise [127]

$$G(t, x) = \sum_{n=0}^{\infty} \mathcal{C}_n(x)t^n \quad (\text{A.24})$$

u okolini tačke $t = 0$ za $|t| < 1$. Koristeći rekurentnu relaciju (A.3) i početne uslove (A.2) može se pokazati da generatrisa polinoma $\mathcal{C}_n(x)$ ima oblik,

$$G(t, x) = \frac{1}{1-tx+t^2} \quad (\text{A.25})$$



A.2 Lokalizovane eksitacije u polimernom lancu

Energetski spektar elementarnih eksitacija idealnih molekulskih kristala može se relativno jednostavno analizirati [129] u impulsnom prostoru, zahvaljujući translacionoj simetriji kristalne rešetke. Kao što je poznato u tom slučaju se javljaju kolektivne eksitacije, Frenkelovi eksitonii, sa neprekidnim energetskim spektrom. Problem energetskog spektra masivnih kristala sa primesama je već znatno komplikovaniji zbog narušenja translacione invarijantnosti. Teoriju primesnih stanja kod molekulskih kristala formulisao je Rašba [130]. On je istakao da prisustvo primesa može dovesti do pojave lokalizovanih stanja sa diskretnim energijama koje leže iznad ili ispod eksitonske zone. Izračunavanje energija lokalizovanih stanja u direktnom prostoru vezano je sa određenim matematičkim teškoćama zbog pojave diferencnih jednačina. U [131] je pokazano, na primeru beskonačnog lanca molekula sa tačkastim primesnim defektom, da se ove teškoće mogu zaobići pogodnom redefinicijom hamiltonijana.

Mi ćemo razmotriti polimerni lanac konačne dužine sa izotropnom supsticacionom primesom. Zahvaljući konačnom broju molekula u lancu, spektar elementarnih eksitacija se može izračunati upravo u direktnom prostoru. U posmatranom slučaju se pojavljuju dva tipa eksitacija: kolektivne i lokalizovane. Za razliku od beskonačnih struktura, kolektivne eksitacije ovde imaju diskretan karakter. To je posledica prostorne ograničenosti sistema koja dovodi do prostorne (dimenzione) kvantizacije [56]. Za lokalizovana stanja je karakteristično da se mogu javiti ne samo na primesi nego i na krajevima lanca zbog izmenjivih graničnih uslova. Ovde ćemo detaljno ispitati kriterijume za postojanje lokalizovanih stanja.

A.2.1 Hamiltonian sistema i eksitonske energije

Kao što je napomenuto, polimerni lanac konačne dužine $L = Na$ sastoji se od $N+1$ molekula („host“) na jednakim udaljenostima a . U lancu je prisutna jedna izotropna supsticaciona primesa („guest“) na proizvolnjem čvoru $s \in [0, N]$. Da bi pojednostavili proračune, koristićemo dvonivosku šemu za singletne eksitone kao i aproksimaciju najbližih suseda. U tom slučaju, hamiltonian posmatranog sistema u direktnom prostoru ima oblik:

$$H = \sum_{n=0}^N \left[\Delta_n B_n^+ B_n + (1 - \delta_{n,0}) V_{n,n-1} B_n^+ B_{n-1} + (1 - \delta_{n,N}) V_{n,n+1} B_n^+ B_{n+1} \right] \quad (\text{A.26})$$

gde su B_n^+ i B_n boze operatori koji kreiraju i anihiliraju eksitacije na host ($n \neq p$) i gest ($n = p$) molekulu. Ovde se pojavljuju kronekerovi simboli $\delta_{n,0}$ i $\delta_{n,N}$ zbog konačne dužine lanca, čime se obezbeđuje odsustvo molekula za $n \leq -1$ i $n \geq N+1$. Energiju pobuđivanja izolovanog molekula Δ_n na proizvolnjem čvoru lanca, napisaćemo u obliku,

$$\Delta_n = \Delta (1 + d \delta_{n,p}) \quad (\text{A.27})$$

gde je $d = \Delta^{-1} (\Delta_p - \Delta)$ - relativna razlika energija pobuđenja gest (Δ_p) i host molekula (Δ). Na isti način možemo izraziti i matrične elemente dipol-dipolne interakcije gest i host molekula:

$$V_{p,p\pm 1} = V (1 + s) \quad (\text{A.28})$$

gde je uveden novi parametar (s) relativne razlike. Pored toga, ovde ćemo prepostaviti da na krajevima lanca može doći do modifikacije matričnih elemenata $V_{n,n\pm 1}$ u odnosu na njihove vrednosti unutar lanca:

$$V_{0,1} \equiv V_{N-1,N} = V(1+e) \quad (\text{A.29})$$

Ova prepostavka je uobičajena u teoriji površinskih stanja molekulskih kristala [132]. Koristeći relacije (A.28) i (A.29), matrične elemente dipol-dipol interakcije možemo napisati u opštem obliku,

$$\begin{aligned} V_{n,n-1} &= V[1 + s(\delta_{n,p} \delta_{n,p+1}) + e(\delta_{n,1} \delta_{n,N})] \\ V_{n,n+1} &= V[1 + s(\delta_{n,p-1} \delta_{n,p}) + e(\delta_{n,0} \delta_{n,N-1})] \end{aligned} \quad (\text{A.30})$$

pogodnom za dalje proračune.

Energije elementarnih eksitacija sistema opisanog hamiltonijanom (A.26) i relacijama (A.27 – A.30), mogu se odrediti metodom Grinovih funkcija [2, 10] na sledeći način. Dvovremenska komutatorska Grinova funkcija :

$$G_{nm}(t) = \Theta(t) \langle [B_n(t), B_m^+(0)]_- \rangle \quad (\text{A.31})$$

($n, m = 0, 1, 2 \dots N$) zadovoljava jednačinu kretanja:

$$i\hbar \frac{d}{dt} G_{nm}(t) = i\hbar \delta(t) \delta_{n,m} + \Theta(t) \langle [B_n(t), H]_-, B_m^+(0) \rangle_- \quad (\text{A.32})$$

Zbog narušenja translacione simetrije, mogu se uvesti samo vremenske ali ne i prostorne Fourier transformacije za Grinovu funkciju (A.31),

$$G_{nm}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t} G_{n,m}(\omega) d\omega \quad (\text{A.33})$$

Uvrštavajući (A.33) u (A.22), nakon izračunavanja potrebnih komutatora, dobijamo sledeći sistem jednačina za $G_{n,m}(\omega)$:

$$\begin{aligned} \rho G_{0,m}(\omega) - (1+e) G_{1,m}(\omega) &= \mathcal{K} \delta_{0,m} \\ -(1+e) G_{0,m}(\omega) + \rho G_{1,m}(\omega) - G_{2,m}(\omega) &= \mathcal{K} \delta_{1,m} \\ &\vdots \\ -G_{p-2,m}(\omega) + \rho G_{p-1,m}(\omega) - (1+s) G_{p,m}(\omega) &= \mathcal{K} \delta_{p-1,m} \\ -(1+s) G_{p-1,m}(\omega) + \rho_p G_{p,m}(\omega) - (1+s) G_{p+1,m}(\omega) &= \mathcal{K} \delta_{p,m} \quad (\text{A.34}) \\ -(1+s) G_{p,m}(\omega) + \rho G_{p+1,m}(\omega) - G_{p+2,m}(\omega) &= \mathcal{K} \delta_{p+1,m} \\ &\vdots \\ -G_{N-2,m}(\omega) + \rho G_{N-1,m}(\omega) - (1+e) G_{N,m}(\omega) &= \mathcal{K} \delta_{N-1,m} \\ -(1+e) G_{N-1,m}(\omega) + \rho G_{N,m}(\omega) &= \mathcal{K} \delta_{N,m} \end{aligned}$$

gde je:

$$\rho = \frac{\hbar\omega - \Delta}{V}, \quad \rho_p = \rho - \frac{\Delta}{V} d, \quad \mathcal{K} = \frac{i\hbar}{2\pi V} \quad (\text{A.35})$$

Sistem jednačina (A.34) se može napisati u matričnoj formi kao:

$$\mathcal{D}_{N+1}(\rho; d, s, e) \mathcal{G}_m(\omega) = \mathcal{K}_m \quad (\text{A.36})$$

gde su $\mathcal{G}_m(\omega)$ i \mathcal{K}_m matrice kolona date sa:

$$\mathcal{G}_m(\omega) = \begin{pmatrix} G_{0,m} \\ G_{1,m} \\ \vdots \\ G_{N,m} \end{pmatrix}; \quad \mathcal{K}_m = \mathcal{K} \begin{pmatrix} \delta_{0,m} \\ \delta_{1,m} \\ \vdots \\ \delta_{N,m} \end{pmatrix} \quad (\text{A.37})$$

Determinanta $D_{N+1}(\rho)$ sistema jednačina (A.36) ima oblik:

$$\begin{aligned} D_{N+1}(\rho) = & (1+s)^2(A_{p-2}A_{N-p-1} + A_{p-3}A_{N-p} - 2\rho A_{p-2}A_{N-p}) + \\ & + \rho \rho_p (\rho_p - 1) A_{p-3}A_{N-p} + \rho_p (\rho A_{p-2} - A_{p-3}) A_{N-p-1} \end{aligned} \quad (\text{A.38})$$

pri čemu je

$$A_n(\rho) = \rho C_{n-1}(\rho) - (1+s)^2 C_{n-2}(\rho) \quad (\text{A.39})$$

gde su $C_n(\rho)$ polinomi tipa Čebiševa [126] koji zadovoljavaju rekurzivnu relaciju:

$$C_{n+1}(\rho) = \rho C_n(\rho) - C_{n-1}(\rho) \quad (\text{A.40})$$

uz početne uslove:

$$C_0(\rho) = 1, \quad C_1(\rho) = \rho \quad (\text{A.41})$$

Rešavanjem sistema jednačina (A.36) mogu se dobiti dijagonalne komponente Grinove funkcije,

$$G_{n,n}(E) = \mathcal{K} \sum_{\nu=1}^{N+1} \frac{g_{n,n}(\rho_{\nu})}{E - E_{\nu}}, \quad E \equiv \hbar\omega/V \quad (\text{A.42})$$

čije spektralne težine [15],

$$g_{n,n}(\rho_{\nu}) = \frac{\Delta_N(\rho_{\nu})}{\frac{d}{d\rho} D_{N+1}(\rho) |_{\rho=\rho_{\nu}}} \quad (\text{A.43})$$

zadovoljavaju pravilo sume,

$$\sum_{n=0}^N g_{n,n}(\rho_{\nu}) = 1, \quad \forall \nu = 1, 2, \dots, N+1 \quad (\text{A.44})$$

Determinanta $\Delta_N(\rho)$ se dobija standardnom procedurom pri rešavanju sistema jednačina (A.36). Pomoću spektralnih težina (A.43), mogu se u spektru izdvojiti lokalizovane eksitacije. Naime, za razliku od kolektivnih eksitacija koje su distribuirane duž lanca u vidu stojećih talasa, kod lokalizovanih eksitacija spektralne težine imaju maksimum na određenom čvoru a sa udaljavanjem od njega brzo opadaju. To je posledica činjenice da talasna funkcija sadrži eksponencijalno opadajući faktor $e^{-\kappa n}$ gde je $\kappa > 0$ [133]–[138].

A.2.2 Numerički rezultati i diskusija

Eksitonske energije su dobijene numeričkim izračunavanjem nula polinoma (A.38) za polimerni lanac od devet ($N = 8$) molekula sa supstitionom izotropnom primesom na sredini lanca. Za energiju pobuđenja izolovanih host molekula i matrični element njihove dipol-dipolne interakcije, uzete su vrednosti $\Delta = 4\text{eV}$ i $V = 0.1\text{eV}$, kao u [131]. Ovim vrednostima odgovara eksitonska zona u granicama $[3.8 - 4.2]\text{eV}$. Cilj ovih analiza jeste da se ispita uticaj krajeva lanca (e) i primese (s, d) na eksitonski spektar. Dobijeni rezultati, koji su prikazani u Tabeli A2.1 i na slikama A2.2 i A2.3, sugerisu sledeće bitne zaključke.

Osnovna karakteristika eksitonskog spektra jeste njegova diskretnost (vidi Tabelu), što je direktna posledica prostorne ograničenosti posmatranog sistema [132]. Pored diskretnih kolektivnih eksitacija, ovde se mogu pojaviti i lokalizovane eksitacije sa energijama koje leže izvan eksitonske zone. Energije i broj ovih eksitacija zavise od vrednosti parametara (e, s, d).

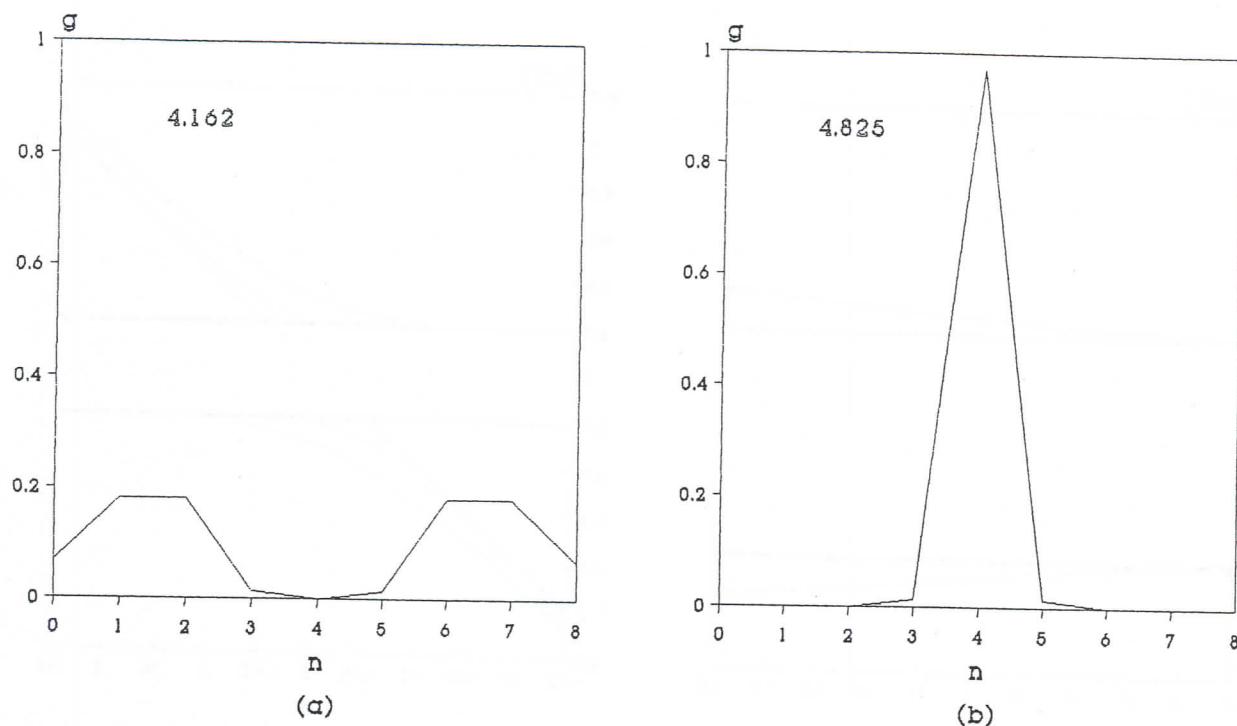
Tabela A2.1

Eksitonske energije za različite vrednosti slobodnih parametara

$e = 0.0$	$e = 0.5$	$e = 1.0$	$e = 0.0$	$e = 0.0$
$s = 0.0$	$s = 0.0$	$s = 0.0$	$s = 0.0$	$s = 0.5$
$d = 0.0$	$d = 0.0$	$d = 0.0$	$d = 0.2$	$d = 0.0$
3.810	3.796	3.767	3.835	3.760
3.838	3.810	3.771	3.838	3.838
3.882	3.854	3.839	3.930	3.868
3.938	3.921	3.913	3.938	3.938
4.000	4.000	4.000	4.053	4.000
4.062	4.079	4.087	4.062	4.062
4.118	4.146	4.161	4.158	4.132
4.162	4.190	4.229	4.162	4.162
4.190	4.203	4.233	4.825	4.240

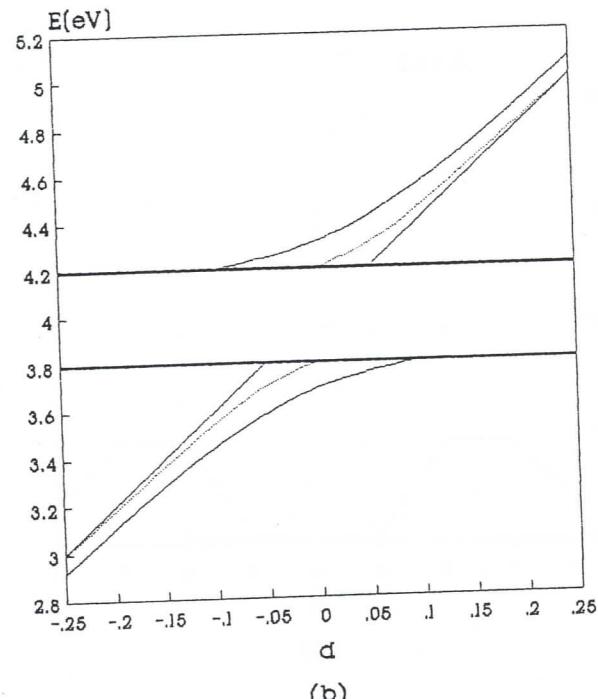
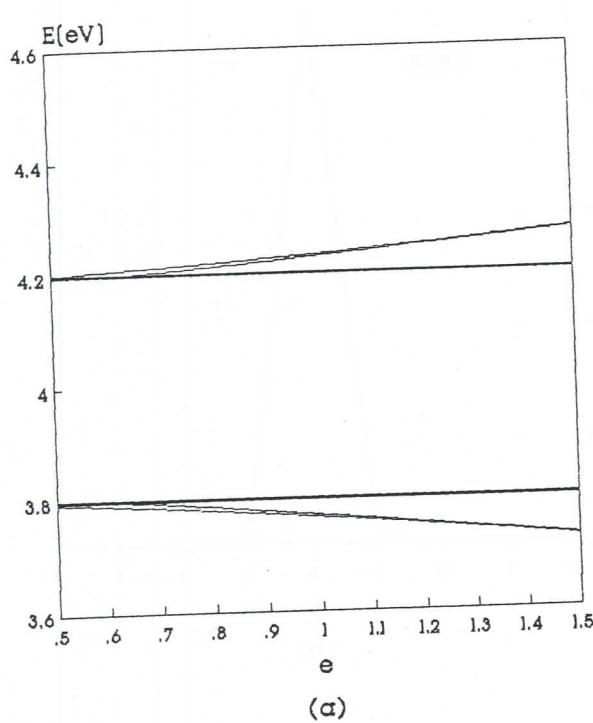
Nije teško videti da su u slučaju polimernog lanca sa „slobodnim” krajevima ($e = 0$) bez primese ($s = d = 0$), prisutne samo kolektivne eksitacije. Za jednu od ovih eksitacija (slično je i za ostale), na slici A2.2(a) prikazane su vrednosti spektralnih težina na različitim čvorovima polimernog lanca.

Na osnovu podataka iz Tabele, može se zaključiti da se zavisno od vrednosti dipol-dipolne interakcije (e) na krajevima lanca, lokalizovana stanja mogu pojaviti ne samo na krajnjim molekulama, već i na njima susednim molekulama. Izmenom energije pobuđenja izolovanog primesnog molekula, mogu se dobiti (jako) lokalizovana stanja kako na primesnom čvoru tako i na njemu susednim čvorovima. Vrednosti spektralnih težina u tom slučaju, prikazane su na slici A2.2(b). Rezultati detaljnije analize, slika A2.3(a), pokazuju da se dva ili četiri stanja lokalizovana na krajevima lanca, pojavljuju ukoliko je interakcija host molekula na krajevima lanca veća za 50% odnosno 60% respektivno. Smanjenje ove interakcije ($e < 0$) ne može dovesti do pojave lokalizovanih stanja.



Sl.A2.2 Vrednosti spektralnih težina na čvorovima lanca kod:
 (a) kolektivnih eksitacija, (b) lokalizovanih eksitacija.

Uticaj primese (parametri d i s) na energiju lokalizovanih stanja prikazan je na slici A2.3(b). Stanja lokalizovana na primesi se javljaju kako pri povećanju ($d > 0$) tako i pri smanjenju ($d < 0$) energije pobuđenja gest molekula. U prvom slučaju lokalizovana stanja leže iznad, a u drugom slučaju ispod eksitonske zone. Ova slika takođe ilustruje zavisnost energije lokalizovanih stanja od gest-host interakcije. Karakteristično je da povećanje ove interakcije ($s > 0$) može dovesti do pojave dva lokalizovana stanja kod određenih vrednosti energija pobuđenja izolovanog „guest” molekula. Pri smanjenju ove interakcije ($s < 0$) može se dobiti samo jedno lokazilovano stanje.



Sl.A2.3 (a) Uticaj parametra e na eksitonska stanja lokalizovana na krajevima lanca od devet molekula u slučaju $d = s = 0$. (b) Uticaj parametra d na lokalizovana stanja pri različitim vrednostima gest-host interakcije za $e = 0$. Puna, tačkasta i isprekidana linija su za $s = 0.8, 0.0$ i -0.8 , respektivno.

Ovaj primer pokazuje da se energetski spektar prostorno ograničenih sistema može uspešno analizirati u direktnom prostoru [139]. Metod koji je ovde opisan može se generalisati u slučaju tankih filmova molekulskih kristala [140, 141].

A.3 Eksitonske koncentracije u tankim filmovima

Koncentracija eksitona u kristalima zavisi od snage svetlosnog izvora kojim se kristal osvetljava. Najveće koncentracije, reda veličine 10^{-4} , postižu se kada se kristal osvetljava laserskom svetlošću. Postoji praktični interes da se koncentracija eksitona poveća i ovde ćemo se baviti tim problemom. Ispitaćemo kakve su eksitonske koncentracije u tankim filmovima jer narušenje translacione simetrije može da dovede do lokalnih povećanja koncentracije. Tako je u radu [138] procenjeno da površinske koncentracije eksitona mogu da budu reda 0.1. U pomenutom radu procena je usledila na bazi analize talasne funkcije eksitona u filmu. Ovde će eksitonski sistem biti analiziran metodom Grinovih funkcija, [5, 6, 10] jer ovaj metod daje mogućnost direktnog proračuna koncentracije u bilo kom sloju filma. Da bi smo analizu uprostili posmatraćemo dvonivosku šemu optičkih pobuđenja. To je takva šema prema kojoj molekul iz osnovnog stanja može da dospe pod dejstvom svetlosti u samo jedno pobuđeno stanje. Tada su operatori kreacije i anihilacije eksitona Pauli operatori. Za dati eksitonski hamiltonijan metoda Grinovih funkcija biće korišćen u aproksimaciji Tjablikova koja je dala veoma dobre rezultate u analizi Kiri temperature feromagnetika [2]. Ova aproksimacija predstavlja uprošćenu varijantu aproksimacije haotičnih faza (*RPA*). U optici i teoriji feroelektrika, Tjablikovska aproksimacija korišćena je da se formuliše ekvivalentni bozonski hamiltonijan [138, 144, 145, 146] pomoću koga je dobijen niz interesantnih rezultata važnih za apsorpciju svetlosti. Biće analiziran film koji je normalno na pravac z ose isečen iz tetragonalne strukture. To znači da je u filmu translaciona invarijantnost zadržana u XY ravnima dok je duž z pravca narušena.

A.3.1 Eksitonske Grinove funkcije za tanke filmove

Hamiltonijan eksitonskog sistema koji odgovara dvonivojskoj šemi molekulskih pobuđenja ima oblik,

$$H = \Delta \sum_{\vec{n}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}} + \sum_{\vec{n}, \vec{m}} D_{\vec{n}, \vec{m}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}} + \sum_{\vec{n}, \vec{m}} X_{\vec{n}, \vec{m}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}} + \sum_{\vec{n}, \vec{m}} Y_{\vec{n}, \vec{m}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}} P_{\vec{m}}^+ P_{\vec{m}} \quad (\text{A.45})$$

Upotrebljene oznake su: $\Delta = \epsilon_F - \epsilon_0$ je energija pobuđenja izolovanog molekula i iznosi nekoliko eV, D, X i Y su matrični elementi dipol-dipolne interakcije koji su po redu veličine znatno manji od Δ , P^+ i P su Pauli operatori kreacije i anihilacije eksitona. Ovi operatori zadovoljavaju komutacione relacije,

$$[P_{\vec{n}}, P_{\vec{m}}^+] = (1 - 2P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}}) \delta_{\vec{n}, \vec{m}} \quad (\text{A.46})$$

$$[P_{\vec{n}}, P_{\vec{m}}] = [P_{\vec{n}}^+, P_{\vec{m}}^+] = 0 \quad P_{\vec{n}}^2 = (P_{\vec{n}}^+)^2 = 0$$

Kao što je napred rečeno, eksitonski sistem analiziraćemo pomoću dvovremenske paulionske Grinove funkcije,

$$G_{\vec{a}, \vec{b}}(t) \equiv \langle \langle P_{\vec{a}}(t) | P_{\vec{b}}^+(0) \rangle \rangle = \Theta(t) \langle [P_{\vec{a}}(t), P_{\vec{b}}^+(0)] \rangle \quad (\text{A.47})$$

Ako se Grinova funkcija (A.47) diferencira po vremenu i iskoristi jednačina kretanja za operator $P_{\vec{a}}(t)$ dolazi se do sledeće jednačine,

$$\begin{aligned}
& i\hbar \frac{d}{dt} \langle \langle P_{\vec{a}}(t) | P_{\vec{b}}^+(0) \rangle \rangle = \\
& = i\hbar \delta_{\vec{a},\vec{b}} \delta(t) (1 - 2 \langle P_{\vec{a}}^+ P_{\vec{a}} \rangle) + \Delta \langle \langle P_{\vec{a}}(t) | P_{\vec{b}}^+(0) \rangle \rangle + \sum_{\vec{m}} D_{\vec{a},\vec{m}} \langle \langle P_{\vec{a}}(t) | P_{\vec{b}}^+(0) \rangle \rangle - \\
& - 2 \sum_{\vec{m}} X_{\vec{a},\vec{m}} \langle \langle P_{\vec{a}}^+(t) P_{\vec{a}}(t) P_{\vec{m}}(t) | P_{\vec{b}}^+(0) \rangle \rangle - 2 \sum_{\vec{m}} Y_{\vec{a},\vec{m}} \langle \langle P_{\vec{m}}^+(t) P_{\vec{m}}(t) P_{\vec{a}}(t) | P_{\vec{b}}^+(0) \rangle \rangle \quad (\text{A.48})
\end{aligned}$$

Tjablikovska aproksimacija za dvočestične Grinove funkcije koje figurišu u (A.48) sastoji se u sledećem dekuplovanju,

$$\langle \langle P_{\vec{n}}^+(t) P_{\vec{n}}(t) P_{\vec{m}}(t) | P_{\vec{l}}^+(0) \rangle \rangle = \langle P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}} \rangle \langle \langle P_{\vec{m}}(t) | P_{\vec{l}}^+(0) \rangle \rangle \quad (\text{A.49})$$

Ako se u (A.48) iskoristi aproksimacija (A.49) i zatim izvrše Furijeove transformacije vreme-učestanost,

$$\langle \langle P_{\vec{n}}(t) | P_{\vec{m}}^+(0) \rangle \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} \langle \langle P_{\vec{n}} | P_{\vec{m}}^+ \rangle \rangle_{\omega} \quad (\text{A.50})$$

dolazi se do jednačine,

$$\begin{aligned}
& \left(E - \Delta - \sum_{\vec{m}} D_{\vec{a},\vec{m}} + 2 \sum_{\vec{m}} Y_{\vec{a},\vec{m}} C_{\vec{m}} \right) \langle \langle P_{\vec{a}} | P_{\vec{b}}^+ \rangle \rangle_{\omega} = \\
& = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{\vec{a},\vec{b}} (1 - 2C_{\vec{a}}) - \sum_{\vec{m}} X_{\vec{a},\vec{m}} (1 - 2C_{\vec{a}}) \langle \langle P_{\vec{m}} | P_{\vec{b}}^+ \rangle \rangle_{\omega} \quad (\text{A.51})
\end{aligned}$$

gde je:

$$\langle P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}} \rangle = \frac{1 - 2\sigma_{\vec{n}}}{2} = C_{\vec{n}} \quad (\text{A.52})$$

U idealnoj strukturi koncentracija $C_{\vec{n}} \equiv C$ i parametar uređenosti $\sigma_{\vec{n}} = 1 - 2C$ ne zavise od indeksa čvora. U filmu, kod koga je struktura narušena, koncentracija se menja od sloja do sloja.

Ako se Hamiltonian filma napiše u aproksimaciji najблиžih suseda i prepostavi da se matrični elementi dipol-dipolne interakcije menjaju u graničnim slojevima na sledeći način,

$$\begin{aligned}
D_{n_x n_y n_z; n_x \pm 1 n_y n_z} &= D_{n_x n_y n_z; n_x n_y \pm 1 n_z} \Rightarrow D_{n_z, n_z} = D(1 + \alpha_{xy} \delta_{n_z,0} + \alpha_{xz} \delta_{n_z, N_z}) \\
D_{n_x n_y n_z; n_x n_y n_z + 1} &\Rightarrow D_{n_z, n_z + 1} = D(1 - \delta_{n_z, N_z} + \alpha_z \delta_{n_z,0} + \alpha_z \delta_{n_z, N_z - 1}) \quad (\text{A.53}) \\
(D_{0,-1} &= D_{N_z, N_z + 1} = 0)
\end{aligned}$$

gde su α_{xy} and α_z popravke matričnih elemenata, iz (A.51) sledi sistem jednačina,

$$\begin{aligned}
(\rho + a) G_{0,m_z}(k_x, k_y; \omega) + G_{1,m_z}(k_x, k_y; \omega) &= \mathcal{K} \delta_{0,m_z} \\
G_{0,m_z}(k_x, k_y; \omega) + (\rho + b) G_{1,m_z}(k_x, k_y; \omega) + G_{2,m_z}(k_x, k_y; \omega) &= \mathcal{K} \delta_{1,m_z} \\
G_{n_z-1,m_z}(k_x, k_y; \omega) + \rho G_{n_z,m_z}(k_x, k_y; \omega) + G_{n_z+1,m_z}(k_x, k_y; \omega) &= \mathcal{K} \delta_{n_z,m_z} \\
G_{N_z-2,m_z}(k_x, k_y; \omega) + (\rho + b) G_{N_z-1,m_z}(k_x, k_y; \omega) + G_{N_z,m_z}(k_x, k_y; \omega) &= \mathcal{K}_\alpha \delta_{N_z-1,m_z} \\
G_{N_z-1,m_z}(k_x, k_y; \omega) + (\rho + a) G_{N_z,m_z}(k_x, k_y; \omega) &= \mathcal{K} \delta_{N_z,m_z} \\
(m_z &= 0, 1, \dots, N_z) \quad (\text{A.54})
\end{aligned}$$

gde su $G_{n,m}$ -Fourijerovi likovi od $G_{\vec{n},\vec{m}}$,

$$G_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z}(\omega) = \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{ik_x a_x (n_x - m_x) + ik_y a_y (n_y - m_y)} G_{n_z, m_z}(k_x, k_y; \omega) \quad (\text{A.55})$$

Ostale oznake u sistemu (A.54) su,

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{1}{X(1-2C)} [E - E_0 - 6D - 12YC - 2X(1-2C)(\cos a_x k_x + \cos a_y k_y)], \quad E = \hbar\omega \\ a &= \frac{D(4\alpha_{xy} + \alpha_z - 1) - 2Y}{X(1-2C)}, \quad b = -\frac{D\alpha_z}{X(1-2C)}, \quad \mathcal{K} = \frac{i\hbar}{2\pi X(1-2C)} \end{aligned} \quad (\text{A.56})$$

Determinanta sistema (A.54) može se izraziti pomoću Čebišovljevih polinoma $C_n(\rho)$ [126] na sledeći način:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{N_z+1}(\rho) &= [(\rho + a)(\rho + b) - 1] [\mathcal{C}_{N_z-1}(\rho) + (a + b)\mathcal{C}_{N_z-2}(\rho) + ab\mathcal{C}_{N_z-3}(\rho) + b\mathcal{C}_{N_z-4}(\rho)] \\ &\quad - (\rho + a) [\mathcal{C}_{N_z-2} + (a + b)\mathcal{C}_{N_z-3}(\rho) + ab\mathcal{C}_{N_z-4}(\rho) + b\mathcal{C}_{N_z-5}] \end{aligned} \quad (\text{A.57})$$

Determinanta (A.57) definiše eksitonski zakon disperzije:

$$E_\nu(k_x, k_y) = \eta_\nu(k_x, k_y) + q(k_x, k_y), \quad \eta_\nu(k_x, k_y) = E_0 + 6D + 12YC + X(1-2C)\rho_\nu \quad (\text{A.58})$$

gde su ρ_ν nule polinoma (A.57) i $q(k_x, k_y) = 2[\cos(a_x k_x) + \cos(a_y k_y)]$.

Dijagonalne Grinove funkcije, slično onome što je urađeno u magnetizmu [147], biće iskorišćene za proračun eksitonskih koncentracija. Ove funkcije imaju oblik,

$$G_{n_z, n_z}(k_x, k_y; E) = \frac{i\hbar}{2\pi} \sum_{\nu=1}^{N_z+1} \frac{g_{n_z, n_z}(\rho_\nu)}{E - E_\nu(k_x, k_y)} \quad (\text{A.59})$$

gde su spektralne težine Grinove funkcije [15] date sa:

$$g_{n_z, n_z}(\rho_\nu) = \frac{\frac{d}{d\rho} \mathcal{D}_{N_z+1}(\rho) |_{\rho=\rho_\nu}}{\frac{B_{n_z}(\rho) B_{N_z-n_z}(\rho)}{d\rho}} \quad (\text{A.60})$$

pri čemu je,

$$B_n(\rho) = \mathcal{C}_n + (a + b)\mathcal{C}_{n-1}(\rho) + ab\mathcal{C}_{n-2}(\rho) + b\mathcal{C}_{n-3}(\rho) \quad (\text{A.61})$$

Formule (A.59 – A.61) pružaju mogućnost da se ispitaju koncentracije eksiton po slojevima filma, kao i da se pronađu takvi granični uslovi koji vode na oštvo povećanje koncentracije. Osim toga u filmu se pojavljuje dva tipa eksiton, zapreminske pri $-2 < \rho_\nu < 2$ i površinske za $|\rho_\nu| > 2$.

A.3.2 Spektri eksitona i njihova prostorna distribucija

Korišćenjem formula (A.58) isvršen je numerički proračun energija eksitona u filmu ($N_z = 5$) za različite vrednosti površinskih parametara (α_{xy}, α_z). Na slici A3.1(a) vrednosti parametara su $(0.2, 0)$. Sa slike se vidi da sve energije eksitona u filmu leže u intervalu između graničnih energija u balku.

Ako su vrednosti površinskih parametara $(-0.2, 0)$, slika A3.1(b), onda dva nivoa energije izlaze van intervala energija u balku a preostala četiri nivoa leže između minimalne i maksimalne energije u balku. Nivoi koji izlaze van balkovskog intervala mogu se interpretirati kao površinski eksitonii[132].

Spektralne težine su proračunate za slučaj sa slike A3.1(b) kada imamo i zapreminska i površinska stanja. Spektralne težine za zapreminska stanja date su na slici A3.2(a) i vidi se da su one manje ili više ravnomerno raspoređene po slojevima. Na slici A3.2(b) su prikazane spektralne težine za površinska stanja i vidi se da su one ekstremno velike u graničnim slojevima što je i trebalo očekivati.

Osnovni cilj ovde je bio da se ispitaju mogućnosti za povećanje eksitonske koncentracije. Da bismo odredili eksitonske koncentracije treba navesti formulu za gustinu eksitonskih stanja kod tankih filmova. Lokalne gustine eksitonskih stanja su izračunate polazeći od izraza:

$$d_{n_z}(E) = \frac{2}{\hbar} \sum_{k_x, k_y} \operatorname{Re} G_{n_z n_z}(k_x, k_y; E + i0^+) \quad (\text{A.62})$$

Koristeći (A.59) može se izračunati realni deo Grinove funkcije, tako da izraz (A.62) prelazi u:

$$d_{n_z}(\mathcal{E}) = \frac{N_x N_y}{4\pi} \sum_{\nu=1}^{\nu_E} g_{n_z, n_z}(\rho_\nu) \Theta(\mathcal{E} - \Delta_\nu) \quad (\text{A.63})$$

$$\Delta_{\nu_E} < \mathcal{E} < \Delta_{\nu_E+1}$$

gde je $\mathcal{E} = E/X(1 - 2C)$ i $\Delta_\nu = \eta_\nu/X(1 - 2C)$. Spektralne težine g u opštem slučaju zavise od k_x i k_y tako da je proračun veličina d_{n_z} veoma komplikovan.

Eksitonske koncentracije na svakom sloju filma, određene su izrazom:

$$C_{n_z} = \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x, k_y} \int_{-\infty}^{\infty} dE \langle C_{n_z}(k_x, k_y) \rangle_E \quad (\text{A.64})$$

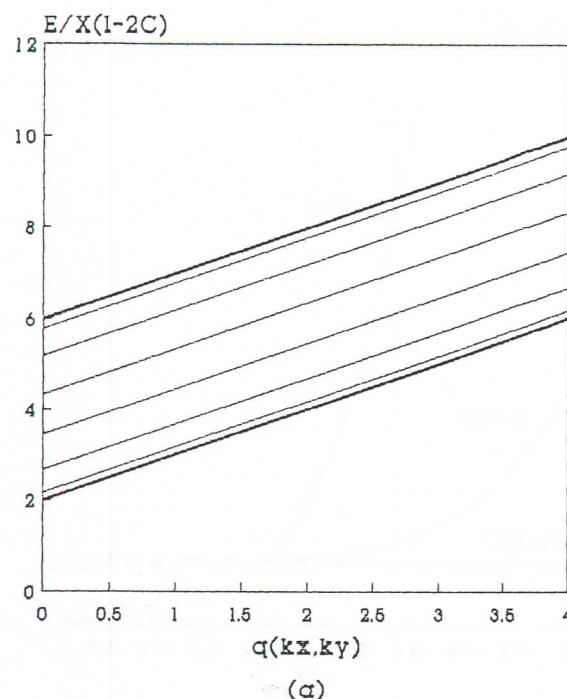
gde je Fourier transform korelace funkcije,

$$\langle C_{n_z}(k_x, k_y) \rangle_E = \frac{2}{\hbar} \frac{\operatorname{Re} G_{n_z, n_z}(k_x, k_y; E + i0^+)}{e^{\beta E} - 1} \quad (\text{A.65})$$

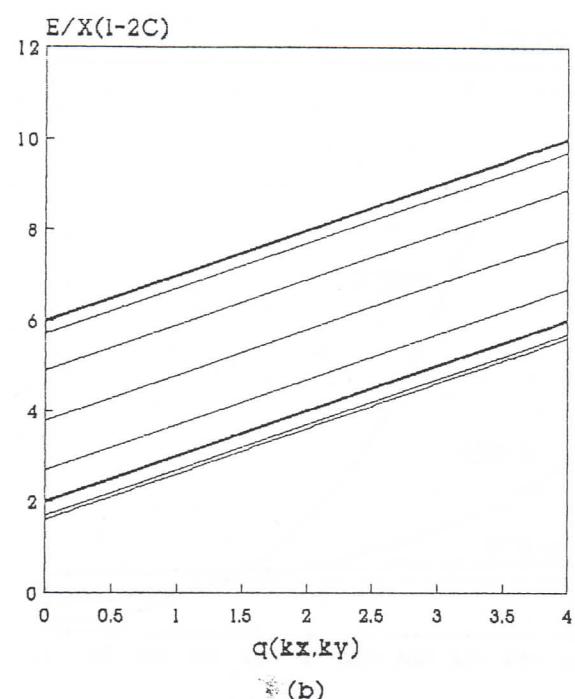
Zamenjujući (A.65) u (A.64), nakon standardnog prelaska sa sume na integral pomoću lokalne gustine stanja (A.63), konačno se dobija:

$$C_{n_z} = \frac{-t}{4\pi} \sum_{\nu=1}^{N_z+1} g_{n_z, n_z}(\rho_\nu) \ln(1 - e^{-\Delta_\nu/t}) \quad (\text{A.66})$$

gde le $t = k_B T/X(1 - 2C)$ bezdimenziona "temperatura".

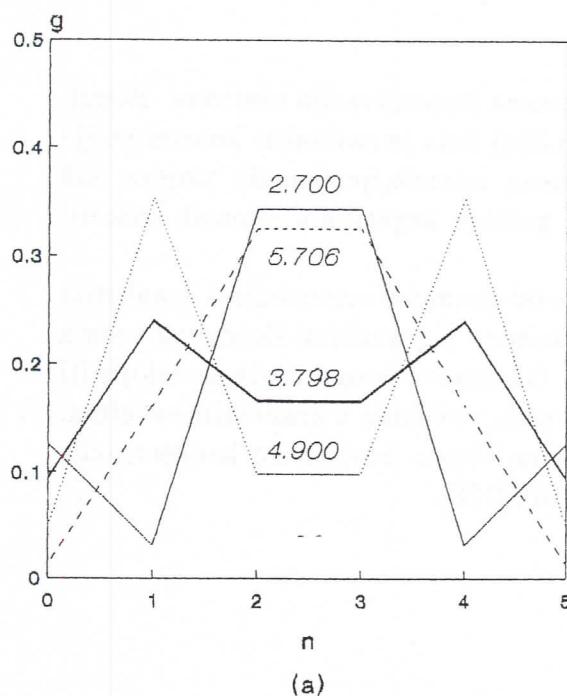


(a)

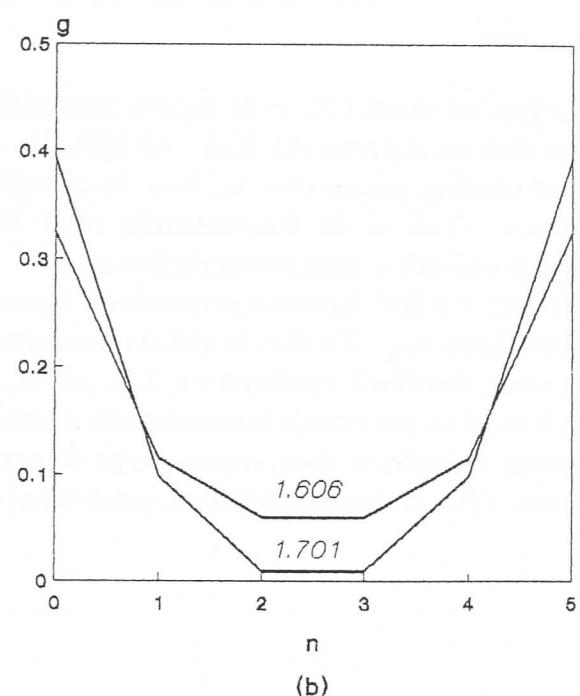


(b)

Sl.A3.1 Eksitonski spektar filma ($N_z = 5$): (a) $\alpha_{xy} = 0.2$, $\alpha_z = 0$ (b) $\alpha_{xy} = -0.2$, $\alpha_z = 0$.

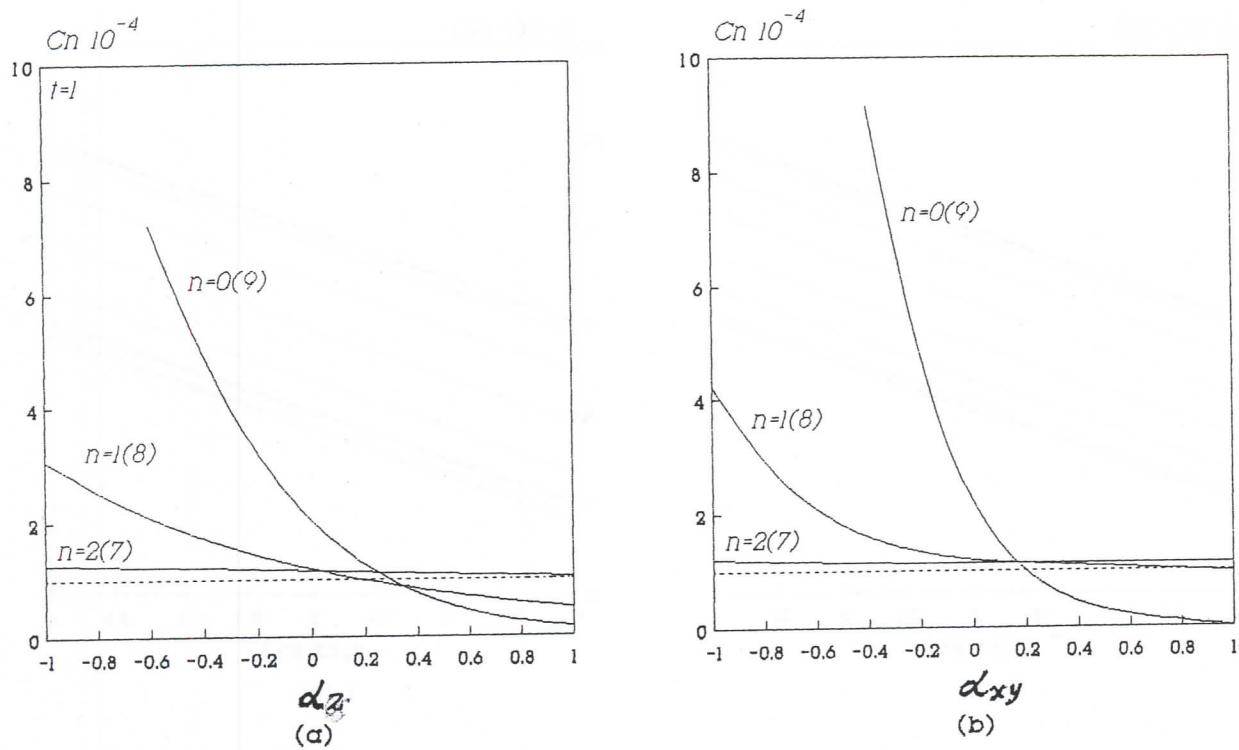


(a)



(b)

Sl.A3.2 Spektralne težine: (a) zapreminske, (b) površinske stanja



Sl.A3.3 Koncentracije eksitona u funkciji promene međumolekularne interakcije:
 (a) u pravcu ose z , (b) u graničnim slojevima filma

Za film od deset ($N_z = 9$) slojeva numerički je ispitana koncentracija eksitona. Rezultati su dati na slikama A3.3(a) i A3.3(b). Na slici A3.3(a) data je zavisnost koncentracije od površinskog parametra α_z koji karakteriše promenu interakcije između slojeva duž z -pravca. Vidi se da koncentracija raste kada α_z postaje negativno. Porast koncentracije je najveći u graničnim slojevima.

Na slici A3.3(b) ispitana je zavisnost koncentracije od promene interakcije u graničnim ravnim filma α_{xy} . Na slici se vidi da koncentracija eksitona u graničnim slojevima veoma oštros raste dostižući vrednost od 0.01 pri $\alpha_{xy} = -1$. Na osnovu ovoga može se zaključiti da su bitnije za povećanje koncentracije interakcije između molekula u graničnim ravnim. Njihovim veštačkim menjanjem mogu se postići veoma visoke površinske koncentracije eksitona. Ovo je kompatibilno za predviđanjem iz rada [138].

Literatura

- [1] N.Zubarev, Usp.Fiz.Nauk **71**, 71 (1960).
- [2] S.V. Tyablikov, Methods in the Quantum Theory of Magnetism, Nauka, Moscow, 1965.
- [3] N.M.Plakida, Nekotorye voprosy kvantovoi teorii tverdogo tela, MGU, Moskwa 1974.
- [4] D.S.Sondheimer, Green's Functions for Solid State Physicist, Benjamin, New York 1974.
- [5] E.N.Economou, Green's Functions in Quantum Physics, Springer-Verlag, Berlin 1979.
- [6] G.Rickayzen, Green's Functions and Condensed Matter, Academic Press, London 1980.
- [7] N.N.Bogolyubov, N.N.Bogolyubov(ml), Bvedenie v kvantovoy statističeskyo mehaniku, Nauka, Moskwa 1984.
- [8] C.Kittel, Quantum Theory of Solids, Wiley & Sons, New York 1963.
- [9] J.M.Ziman, Principles of the Theory of Solids, Univ.Press, Cambridge 1972.
- [10] J.Callaway, Quantum Theory of the Solid State, Academic Press, New York 1974.
- [11] A.S.Davydov, Teoriya tverdogo tela, Nauka, Moskwa 1976.
- [12] N.W. Ashcroft, N.D. Mermin, Solid State Physics, Holt, Rinehart & Winston, New York 1976.
- [13] B.S.Tošić, Statistička fizika, Institut za fiziku, Novi Sad 1978.
- [14] I.Supek, Teorijska fizika i struktura materije II, Školska knjiga, Zagreb 1990.
- [15] G.Mahan, Many Particle Physics, Plenum Press, New York and London 1990.
- [16] N.B.Brandt, S.M.Chudinov, Elektrony i fonony v metalah, MGU, Moskwa 1990.
- [17] H.Haken, Kvanovopolevya teoriya tverdogo tela, Nauka, Moskwa 1980.
- [18] A. Wachniewski, Phys. stat. sol. (b) **104**, 555 (1981).
- [19] S.B.Lazarev, D.Lj.Mirjanić, B.S.Tošić, J.P.Šetrajčić, Zbornik Matice srpske **85**, 47 (1994).
- [20] M.Pantić, S.B.Lazarev, D.Lj.Mirjanić, J.P.Šetrajčić, 11th Internaciona Congress of Mathematical Physics, Paris (1994).
- [21] J.P.Šetrajčić, M.Pantić, S.B.Lazarev, D.Lj.Mirjanić, M.Budinčević, Zbornik PriM **9**, 219 (1995).

- [22] J.P.Šetrajčić, S.M.Stojković, S.B.Lazarev, D.Lj.Mirjanić,
Zbornik PriM 10, 73 (1996).
- [23] S.B.Lazarev, M.Pantić, J.P.Šetrajčić, D.Lj.Mirjanić,
Zbornik PriM 11, prihvaćeno (1997).
- [24] S.Wolfram, Mathematica, A System for Doing Mathematics by Computer,
Addison-Wesley, Redwood City 1991.
- [25] E.L.Nagaev, Magnetiky so slozhnymi obmennymi vzaimodeistviyami, Nauka,
Moskwa 1988.
- [26] A.Ishihara, Statistical Physics, Academic Press, New York-London 1971.
- [27] L.C.Feldman, J.W.Mayer, Fundamentals of Surface and Thin Film Analysis, North-Holland, New York-Amsterdam-London 1986.
- [28] H.H.Chen, P. M. Levy, Phys. Rev. 7 (9), 4267 (1973).
- [29] H.E.Stenley, Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena, Clarendon Press, Oxford 1971.
- [30] A.A.Maradudin, Defekti i kolebatelnii spektr kristallov, MIR, Moskwa 1968.
- [31] Ž.A.Spasojić, Z.V.Popović, Elektrotehnički i elektronski materijali, Promezzia, Beograd 1995.
- [32] L.L.Chang, L.Esaki, Phys. Today Oct. 36 (1992).
- [33] G.S.Pawley, S.L.Chaplot, Phys.stat.sol. (b) 99, 517 (1980).
- [34] V.G.Podoprigora, I.A.Remizov, V.F.Shabanov, A.N.Botvich, Phys.stat.sol.(b) 139, 109 (1987).
- [35] R.E.Allen, G.P.Alldredge, F.W. de Wette, Phys.Rev. B 6 1648 , 1661 (1971).
- [36] V.V.Briksin, D.N.Mirlin, O.A.Firsov, Usp. Fiz. Nauk 113, 29 (1974).
- [37] B.S.Tošić, J.P.Šetrajčić, R.P.Djajić-Jovanović, D.Lj.Mirjanić, Phys.Rev. B 36, 9094 (1987).
- [38] B.S.Tošić, J.P.Šetrajčić, D.Lj.Mirjanić, Z.V.Bundalo, Physica A 184, 354 (1992).
- [39] M.Rich, Phys. Lett. 4, 153 (1963).
- [40] J.Cely, Phys. stat. sol. 4, 521 (1964).
- [41] A.A.Maradudin, J.Melngailis, Phys. Rev. 133, A1188 (1964).
- [42] B.C.Clark, R.Herman, R.F.Wallis, Phys. Rev. 139, A860 (1965).
- [43] A.U.MacRae, Surf. Sci. 2, 52 (1964).

- [44] J.B.Pendry, Low Energy Electron Difraction, Academic Press, London and New York 1974.
- [45] A.Stachulec, *Acta. Phys. Hung.* **51**, 243 (1981).
- [46] R.F.Wallis, D.C.Gazis, *Phys. Rev.* **128**, 106 (1962).
- [47] R.F.Wallis, *Surf. Sci.* **2**, 146 (1964).
- [48] H.E.Elsayed-Ali, *J. Appl. Phys.* **79**, 6853 (1996).
- [49] A.A.Maradudin, R.F.Wallis, *Phys. Rev.* **148**, 945 (1966).
- [50] L.Dobrzynski, A.A.Maradudin, *Phys. Rev. B* **14**, 2200 (1976).
- [51] M.Pantić, J.P.Šetrajčić, S.B.Lazarev, *Zbornik PMF - fizika* **22/23**, 47 (1993).
- [52] D.Lj.Mirjanić, J.P.Šetrajčić, N.V.Delić, V.M.Zorić, A.S.Utješanović, S.B.Lazarev, *Zbornik PMF - fizika* **24/25**, 47 (1995).
- [53] S.B.Lazarev, B.S.Tošić, J.P.Šetrajčić, D.Lj.Mirjanić, *Physica A* poslato (1996).
- [54] J.P.Šetrajčić, S.B.Lazarev, D.Lj.Mirjanić, 22. JUMEH, prihvaćeno (1997).
- [55] T.Wolfram, R.E. de Wames, *Progr. Surf. Sci.* **2**, 233 (1972).
- [56] M.G.Cottam, D.R.Tilley, Introduction to Surface and Superlattice Excitations, Cambridge University Press 1989.
- [57] V.N. Lutskii, *Phys. stat. sol.(a)* **1**, 199 (1970); *FIZIKA* **9** (1983)
- [58] Z.V.Popović, IX kongres fizičara Jugoslavije, Petrovac 1995.
- [59] S.G.Davison, M.Steslicka, Basic Theory of Surface States, Clarendon Press, Oxford 1996.
- [60] M.K.Debe, D.A.King, *Surf. Sci.* **81**, 193 (1979).
- [61] C.R.C Handbook of Chemistry and Physics, 70rd ed. 1989-1990.
- [62] R.P. Feynman, Statistical Mechanics, W.A. Benjamin, Inc. Advanced Book Program Reading, Massachusetts 1972.
- [63] T.Ando, A.B.Fowler, F.Stern, *Rev. Mod. Phys.* **54**, 437 (1984).
- [64] J.Ruvalds, T.Regge, Quantum Liquids, North-Holland Publishing Company 1978.
- [65] N.F.Johnson, *J. Phys. C* **7**, 965 (1995).
- [66] B.A.Tavger, B.J.Demikhovskii, *FTT* **5**, 644 (1963).
- [67] V.B.Sandomirski, *Zh. eksp. teor. Fiz.* **52**, 158 (1967).
- [68] A.V.Čaplik, M.V.Entin, *Zh. eksp. teor. Fiz.* **55**, 990 (1968).

- [69] S.S.Nedorezov, Zh. eksp. teor. Fiz. **51**, 1575 (1966); FTT **12**, 2269 (1970).
- [70] M.I.Kaganov, S.S.Nadorezov, A.M.Rustamova. FTT **12**, (1970).
- [71] V.A.Volkov, T.N.Pinsker, Zh. eksp. teor. Fiz. **72**, 1087 (1977).
- [72] F.K. Schulte, Phys. stat. sol. (b) **79**, 149 (1977).
- [73] A.A.Cotey, Phys. stat. sol. (b) **88**, 207 (1978).
- [74] L.T.Krešišina, E.L.Nagaev, FTT **30**, 1763 (1988).
- [75] G.Bastard, Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructure, Les Editions de Physique, Les Uilis, France 1990.
- [76] J.Kicrul, J.W.Stasiak, M.Kuczynski, Phys. stat. sol. (b) **71**, 119 (1987).
- [77] L.K.Grigoreva, N.S.Liborenko, E.L.Nagaev, S.P.Čižik, Zh. eksp. teor. Fiz. **91**, 1050 (1986).
- [78] C.J.Thompson and J.M.Blatt, Phys.Lett. **5**, 6 (1963).
- [79] J.M.Blatt, C.J.Thompson, Phys. Rev. Letters **10**, 332 (1963).
- [80] V.B.Ogrin, V.N.Lutskii, M.I.Elinson, Zh. eksp. teor. Fiz. Pisma **3**, 114 (1966).
- [81] T.P.Smith at all., Phys. Rev. Lett. **59**, 2802 (1987).
- [82] Lj.M.Ristovski, B.S.Tošić, G.S.Davidović, Physica C **160**, 548 (1989).
- [83] B.S.Tošić, Lj.D.Mašković, R.M.Maksimović, Physica A **211**, 475 (1994).
- [84] M.Pantić, Lj.M.Ristovski, Lj.D.Mašković, B.S.Tošić, Physica A **227**, 43 (1995).
- [85] S.M.Stojković, S.K.Jaćimovski, S.B.Lazarev,
J.P.Šetrajić, D.Lj.Mirjanić, Zbornih PMF - fizika, **24/25**, 84 (1995).
- [86] S.K.Jaćimovski,S.M.Stojković,A.Slavković, J.P.Šetrajić,D.Lj.Mirjanić,S.B.Lazarev,
Zbornik Matice srpske **90**, 95 (1996).
- [87] S.B.Lazarev, M.Pantić, B.S.Tošić, Physica A prihvaćeno (1997).
- [88] J.P.Šetrajić, B.S.Tošić, D.Lj.Mirjanić, S.B.Lazarev, Bal. Phys. Lett. **2**, 741 (1995).
- [89] D.Lj.Mirjanić, J.P.Šetrajić, S.B.Lazarev, Zbornik Matice srpske, **85**, 97 (1994).
- [90] S.B.Lazarev, M.Pantić, S.D.Markoski, J.P.Šetrajić, MIEL, Niš (1997).
- [91] S.R.Streight, D.L.Mills, Phys. Rev. B **37**, 965 (1988).
- [92] A.D.Singh, Phys. Letters **16**, 98 (1965).
- [93] A.Fert in „Ultrathin Magnetic Structure”, edited by B.Heinrich and A.Bland,
Springer-Verlag, Berlin 1992.

- [94] J.C.S.Levy, Surface Science Reports 1, 39 - 119 (1981).
- [95] Dimo I. Uzunov, Masuo Suzuki, Physica A 204, 702 - 740 (1994).
- [96] Anderson P.W., Phys. Rev. 115, 2 (1959).
- [97] Huang N.L., Orbach R., Phys. Rev. Lett. 12, 275 (1964).
- [98] Allen G.A.T., Betts D.D., Proc. Phys. Soc. 91, 341 (1967).
- [99] Harris E.A., Owen J., Phys. Rev. Lett., 11, 9 (1963).
- [100] Joseph R.I., Phys. Rev. A 138, 1441 (1965).
- [101] Rodbel D.S., Jacobs I.S., Owel J., Harris E.A., Phys. Rev. Lett. 11, 10 (1963).
- [102] R.Micnas, J. Phys. C 9, 3307 (1976).
- [103] Adler J., Oitmaa J., Stewart A.M., J. Phys. C 9, 2911 (1976).
- [104] Tiwari M., Srivastava R.N., Il Nuovo Cimento B 58, 323 (1980).
- [105] E.B.Brown, Phys. Rev. B 40 (1), 775 (1989).
- [106] G.S.Chaddha, Phys.stat.sol. (b) 144, K133 (1987).
- [107] J.Unguris, R.J.Cellota and D.T.Pierce, Phys. Rev. Lett. 67, 140 (1991).
- [108] S.Demokritov, J.A.Wolf and P.Grunberg, Europhys. Lett. 15, 881 (1991).
- [109] M.Rurigh, R.Schafer, A.Hubert, R.Moslev, J.A.Wolf, S.Demokritov, P.Grunberg, Phys. stat. sol. A 125, 635 (1991)
- [110] U.Kobler, K.Wagner, R.Wiecher, A.Fuss, W.Zinn, J.Magn.Magn.Mater. 103, 236 (1992).
- [111] J.Barnas, P.Grunberg, J.Magn.Magn.Mater. 82, 186 (1989).
- [112] R.J.Hicken, C.Daboo, M.Gester, A.J.R.Ives, S.J.Gray, J.A.C.Bland, Thin Solid Films 275, 199 - 202 (1996).
- [113] J.Baszynski, T.Tolinski, B.Szymanski, Phys. stat. sol. (a) 153, 179 (1996).
- [114] Yoshiaki Saito, Koichiro Inomata, Keiichiro Yusu, Jpn.J.Appl.Phys. 35, L100 - L103 (1996).
- [115] E.L.Nagaev, Usp. Fiz. Nauk. 136, 61 (1982). [Sov.Phys.Usp. 25, 31 (1982)].
- [116] J.C.Slonczewski, Phys. Rev. Lett. 67, 3172 (1991).
- [117] J.Barnas, J.Magn.Magn.Mater. 123, L21 (1993).
- [118] J.Barnas, P.Grunberg, J.Magn.Magn.Mater. 121, 326 (1993).

- [119] R.P.Erickson, K.B.Hathaway, J.R.Lullen, Phys.Rev. B **47** (5), 2626 (1993).
- [120] S.B.Lazarev, M.Škrinjar, D.Kapor, S.Stojanović, Physica A - poslato (1997).
- [121] Wen-Zhong Shen, Zhen-Ya Li, Physics Letters A **168**, 151 (1992).
- [122] D.Kapor, M.Škrinjar, S.Stojanović, Phys. Lett. A **192**, 413 (1994).
- [123] M.G.Cottam, D.R.Tilly, B.Žekš, J.Phys.C: Solid State Phys. **17**, 1793 (1984).
- [124] L.D.Landau, E.M.Lifshitz, Statistical Mechanics, Nauka, Moskwa 1974.
- [125] D.E.Rutherford, Proc. R. Soc. A **62**, 229 (1947).
- [126] I.S. Gradshteyn and I.M. Ryzhik, Tables of Integrals, Sums, Series and Products Fizmatgiz, Moscow 1962 (p.1046).
- [127] D.S.Mitrinović, D.Ž.Đoković, Specijalne funkcije, Građevinska knjiga, Beograd 1964.
- [128] S.Goldberg, Diference Equations, John Wiley & Sons, New York 1961.
- [129] V.M.Agranovich, Teorija Eksitonov, Nauka, Moskwa 1968.
- [130] E.I.Rashba, Opt. Spectrosc. **2**, 586 (1957).
- [131] B.Čabrić, Lj.Ristovski, G.Davidović, Z.Phys.B, **53**, 79 (1983).
- [132] V.M.Agranovich, R.Loudon, Modern Problems in Condensed Matter Sciences: Surface Excitons, Nauka, Moskwa 1985.
- [133] S.I.Pekar, Zh. eksp. teor. Fiz. **33**, 1022 (1957).
- [134] D.L.Mills, W.M.Suslow, Phys. Rev. **171**, 488 (1968).
- [135] D.L.Mills, A.A.Maradudin, J. Phys. Chem. Sol. **28**, 1855 (1967).
- [136] V.I.Sukakov, FTT **5**, 2207 (1963).
- [137] P.F.Kvencel, S.I.Pekar, FTT **4**, 2813 (1962).
- [138] V.Sajfert, B.S.Tošić, M.M.Marinković, U.F.Kozmidis-Luburić, Physica A **166**, 430 (1990).
- [139] S.B.Lazarev, J.P.Šetražić, D.Lj.Mirjanić, Lj.Ristovski, Ž.Škrbić, J.Phys.Chem.Sol. prihvaćeno (1996).
- [140] M.Pantić, S.B.Lazarev, The fourth International Conference on Dielectric and Related Phenomena, Bielsko-Biala (Poland) 1996.
- [141] B.S.Tošić, M.Pantić, S.B.Lazarev, J.Phys.Chem.Sol. poslato (1996).
- [142] A.S.Davydov, Teoriya molekularnyh eksitonov, Nauka, Moskwa 1968.

- [143] R.Knox, Theory of Excitons, Mir, Moscow 1966.
- [144] B.S.Tošić et all., J. Phys. Chem. Sol. **53**, 1031 (1992).
- [145] D.Lj.Mirjanić, J.P.Šetrajić, B.S.Tošić, Acta Phys. Slov. **37**, 177 (1987).
- [146] U.F.Kozmidis-Luburić, B.S.Tošić, Physica A **153**, 266 (1988).
- [147] Diep The Hung, Phys. stat. sol. (b) **103**, 809, 1981.



UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET

Ključna dokumentacijska informacija

Redni broj:

RBR

Identifikacioni broj:

IBR

Tip dokumentacije: Monografska dokumentacija
TD

Tip zapisa: Tekstualni štampani materijal
TZ

Vrsta rada: Doktorska disertacija
VR

Autor: Mr Svetislav Lazarev
AU

Mentor: Prof. dr Jovan Šetrajčić
MN

Naslov rada: Teorijska istraživanja električnih i magnetnih svojstava tankih filmova
NR

Jezik publikacije: Srpski, latinica
JP

Jezik izvoda: Srpski, engleski
JI

Zemlja publikovanja: Savezna Republika Jugoslavija
ZP

Uže geografsko područje: Srbija, Novi Sad
UGP

Godina: 1997.
GO

Izdavač: Autorski reprint
IZ

Mesto i adresa: Institut za fiziku, Prirodno-matematički fakultet, Novi Sad,
Trg Dositeja Obradovića 4
MA

Fizički opis rada: Rad se sastoji iz 4 glava, 123 strana, 147 citata u bibliografiji, 3 tabele,
59 slika, 3 priloga
FO

Naučna oblast: Fizika
NO

Naučna disciplina: Fizika kondenzovane materije

ND

Predmetna odrednica/Ključne reči:

PO

Tanak film, Grinove funkcije, fononi, elektroni, magnoni

UDK:

Čuva se: u biblioteci Instituta za fiziku i matematiku

ČU

Važna napomena:

VN

Izvod:

IZ

Predmet teorijskih istraživanja ove disertacije su tanki kristalni filmovi različitih materijala. Savremene metode kvantne teorije polja primenjene u fizici kondenzovane materije koriste se za analizu njihovih električnih i magnetna svojstva i dinamike rešetke. Zbog ekstremno male debljine razmatranih filmova (desetak atomskih slojeva) posebna pažnja je posvećena uticaju prostornog kvantovanja i graničnih uslova na ova svojstva. Stalnim poređenjem rezultata za tanke filmove i masivne uzorke, utvrđeno je da se izborom debljine filma i graničnih uslova može direktno upravljati ravnotežnim svojstvima materijala što je od velikog praktičnog značaja.

Datum prihvatanja teme od strane NN veća: 21. mart 1996. godine

DP

Datum odbrane:

DO

Članovi komisije:

KO

Predsednik:

Prof. dr Bratislav Tošić, red.prof. PMF, Novi Sad

Član: Prof. dr Jovan Šetrajčić, red.prof. PMF, Novi Sad, mentor

Član: Prof. dr Dragoljub Mirjanić, red.prof. MF, Banja Luka

UNIVERSITY OF NOVI SAD
FACULTY OF SCIENCES

Key words documentation

Accesion number:

ANO

Identification number:

INO

Document type: Monographic type
DT

Type of record: Text printed material
TR

Contents code: Doctoral thesis
CC

Author: M.Sci. Svetislav Lazarev
AU

Mentor: Prof. dr Jovan Šetrajčić
MN

Title: Theoretical study of electric and magnetic properties of thin films
TI

Language of text: Serbian, Latin
LT

Language of abstract: Serbian, English
LA

Country of publication: Federal Republic of Yugoslavia
CP

Locality of publication: Serbia, Novi Sad
LP

Publication Year: 1997.
PY

Publisher: Author's reprint
PU

Publ. place: Institute of Physics, Faculty of Sciences, Novi Sad,
Trg Dositeja Obradovića 4
PP

Physical description: Thesis is made by 4 chapters, 123 pages, 147 citations in literature,
3 tables, 59 pictures, 3 additional lists
PD

Scientific field: Physics
SF

Scientific discipline: Physics of condensed matter

SD

Subject / Key words:

SKW

Thin film, Green's function, phonons, electrons, magnons

UC:

Holding data: the library in Institute of Physics and Mathematics, Novi Sad, Yugoslavia

HD

Note:

N

Abstract:

AB

The subject of the theoretical studies of this Thesis are the thin crystalline films of various materials. Modern methods of Quantum Field Theory applied to Condensed Matter Physics are used to analyze their electric and magnetic properties and lattice dynamics. Due to extremely small width of films studied (about ten atomic layers), special attention was paid to the influence of the spatial quantization and boundary conditions to these properties. Permanent comparison of the results concerning thin films and bulk samples has shown that by selecting the film width and boundary conditions, one can directly govern the equilibrium properties of the materials which is of great practical interest.

Accepted by the Scientific Board on: March 21, 1996

ASb

Defended:

DE

Thesis defended board:

DB

President:

Prof. dr Bratislav Tošić, Full Professor, Faculty of Sciences, Novi Sad,

Member: Prof. dr Jovan Šetrajčić, Full Professor, Faculty of Sciences, Novi Sad, mentor

Member: Prof. dr Dragoljub Mirjanić, Full Professor, Medical Faculty, Banja Luka.