

UNIVERZITET U NOVOM SADU  
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET  
*DEPARTMAN ZA FIZIKU*

УНИВЕРЗИТЕТ У НОВОМ САДУ  
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ

ПРИМЉЕНО:	16. јул 2007.
ОРГАНИЗ.ЈЕД.	БРОЈ
0603	9/736

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

FONONSKI UDEO U  
TERMODINAMICI NANOFILMOVA

M E N T O R

PROF. DR JOVAN ŠETRAJČIĆ

K A N D I D A T

VELIZAR MONIĆ

NOVI SAD, 2007. godine

## Predgovor

Savremena nauka materijala istražuje mogućnost „pojačavanja” određenih (potrebnih) i „pri-  
gušivanje” drugih (nepotrebnih) fizičkih osobina. U tu svrhu su posebno ispitivani niskodimenzioni  
kristalni sistemi (ultratanki filmovi, superrešetke, te kvantne žice i tačke).

Današnji razvoj tehnike i tehnologije omogućava pravljenje ovakvih kvantnih sistema, eksper-  
imentalni rezultati su prisutni i merna oprema može da ih prati, ali se u domenu teorijskih  
razmatranja (modelovanja i analitičkog rešavanja) ostalo je dosta prostora za rad.

Najveća poteškoća je upravo u slabo i neadekvatno primenljivom matematičkom aparatu. U  
ovom radu se pokazuje da se metode diferencnog računa uz odgovarajuću podršku numeričkih  
proračuna mogu uspešno primeniti na iznalaženje zakona disperzije i Grinovih funkcija fonona u  
ultratankim kristalnim filmovima.

Fononi su osnovna elementarna pobuđenja u fizici čvrstog stanja, određuju sve mehaničke  
osobine sistema, učestvuju u svim transportnim procesima definišući praktično sve relevantne  
karakteristike supstancije. U radu su određene osnovne termodinamičke veličine fononskog pod-  
sistema – Debajevi parametri koji karakterišu prvenstveno sva provodna svojstva kristala.

Ovaj diplomski rad je urađen pod mentorstvom prof. dr Jovana Šetrajčića.

Novi Sad, 15.06.2007.

Velizar Monić

## Sadržaj

<b>1 Uvod</b>	<b>4</b>
<b>2 Fononi u kristalima</b>	<b>5</b>
2.1 Fononi u neograničenim strukturama . . . . .	5
2.2 Formiranje fononskog modela . . . . .	6
2.3 Zakon disperzije fonona . . . . .	7
2.4 Gustina fononskih stanja . . . . .	10
2.5 Fononska termodinamika . . . . .	10
<b>3 Fononi u kristalnim filmovima</b>	<b>14</b>
3.1 Analiza fononskog modela . . . . .	14
3.2 Spektri fonona u filmu . . . . .	17
3.3 Gustina fononskih stanja . . . . .	19
3.4 Termodinamika filma . . . . .	20
<b>4 Zакљуčак</b>	<b>22</b>
<b>5 Literatura</b>	<b>23</b>

## 1 Uvod

Za modernu nauku o materijalima danas je najznačajnije precizno strukturiranje materijala do dimenzija reda veličine nanometara, posebno na polju elektronike, optoelektronike i visokotemperaturske superprovodnosti. Teorijska i eksperimentalna istraživanja osobina niskodimenzionih sistema (superrešetke, tanki filmovi, kvantne žice i kvantne tačke), 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 interesovanja za ovakve sisteme, kao realnije strukture od neograničenih, su mnogobrojni. Fenomeni povezani sa takim dimenzijama dovode do pojave novih i drugačijih, odnosno izmenjenih osobina materijala i specifičnih pojava što je interesantno ne samo sa fundamentalnog fizičkog stanovišta, već su takve strukture od šireg praktičnog značaja.

Fononi predstavljaju osnovna pobuđenja u kristalima i fononski podsistem je u njima uvek prisutan, bez obzira na to da li se kao glavni nosioci mehanizama koji „proizvode“ određene fizičke osobine, pojave i efekte u kristalnim strukturama javljaju elektroni, eksitonii, feroelektronska pobuđenja ili neki drugi vidovi elementarnih ekscitacija. Iz tog razloga, ispitivanje udela i uticaja fononskog podsistema na fizičke karakteristike materijala poseduje veliki značaj za teoriju čvrstog stanja. U ovom radu izvršena je analiza fononskih spektara ultratankih kristalnih filmova metodom dvovremenskih temperaturskih retardovanih Grinovih funkcija. Za rešavanje ovog problema razvijen je i niz drugih matematičkih aparata (metod Hajzenbergovih jednačina kretanja, malih perturbacija, talasnih funkcija itd.), ali je pomenuti formalizam odabran iz sledećih razloga.

1. Iz opšte teorije linearног odziva sistema poznato je da se formiranjem jednačine kretanja za Grinovu funkciju u opštem slučaju dobija nova funkcija Grina, čiji je red viši od reda polazne funkcije. Sukcesivnim ponavljanjem ove procedure dobija se beskonačni lanac međusobno povezanih jednačina za Grinove funkcije, koji se korišćenjem izvesne dovoljno dobre aproksimacije prekida na taj način što se viša Grinova funkcija izražava pomoću prve niže. Od ovog pravila, međutim, izuzeti su tzv. „kvadratni“ hamiltonijani, čije prisustvo obezbeđuje da se u jednačini kretanja ne pojavljuju Grinove funkcije višeg reda. Kao što će u daljem tekstu biti pokazano, hamiltonijan fononskog podsistema superrešetke upravo je takvog oblika.
2. Realni deo pola Grinove funkcije određuje frekvenciju (a samim tim i energiju) elementarnih ekscitacija koje se javljaju u sistemu, dok je recipročna vrednost njegovog imaginarnog dela proporcionalna vremenu života ovih ekscitacija (tj. kvazičestica).

Da bi se izučile posebnosti karakteristika fonona u ultratankim filmovima, moraju se prethodno spomenuti te iste karakteristike u neograničenim kristalnim strukturama i na osnovu toga izvršiti poređenje fundamentalnih karakteristika ovih struktura.

## 2 Fononi u kristalima

Najjednostavniji oblik kretanja u čvrstom telu jeste oscilatorno kretanje konstituenata od kojih je sastavljena kristalna rešetka (atoma, molekula, odnosno jona) oko odgovarajućih položaja ravnoteže. Ukoliko se posmatrana kristalna struktura može smatrati neograničenom, onda je ovo oscilatorno kretanje atoma analogno prostiranju talasnih poremećaja (tj. elastičnih talasa) kroz kristal. Ova činjenica implicira mogućnost uspostavljanja izvesne formalne analogije između mehaničkih oscilacija sredine i prostiranja elektromagnetskih talasa: naime, slično kao što elektromagnetno polje vrši razmennu energiju sa drugim sistemima u nedeljivim elementarnim iznosima  $\hbar\omega$  (tj. fotonima), energija vibracije kristalne rešetke takođe je kvantovana, pri čemu se kvant energije elastičnog talasa naziva **fononom**. S obzirom da nikakav eksperiment direktno analogan fotoelektričnom efektu - koji predstavlja jak dokaz u prilog kvantovanja svetlosti - nije do danas izведен sa fononima, postavlja se pitanje eksperimentalne potvrde njihovog postojanja. Najvažniji dokazi uključuju sledeće.

1. Udeo rešetke u toplotnom kapacitetu čvrstog tela uvek teži nultoj vrednosti kada temperatura teži nuli. Ovo može biti objašnjeno jedino kvantovanjem vibracija kristalne rešetke.
2. X-zraci i neutroni se neelastično rasejavaju na kristalima, pri čemu promene njihove energije odnosno impulsa odgovaraju kreaciji ili anihilaciji jednog ili više fonona.

Dakle, fononi opisuju oscilatorno kretanje u posmatranoj kristalnoj strukturi i - s obzirom da se kristal u smislu njegovih oscilatornih karakteristika može smatrati sistemom povezanih oscilatora - uvode se prilikom kvantomehaničkih analiza linearog oscilatora, čija je energija data izrazom:

$$E_n = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar\Omega, \quad n \in (0, 1, 2, \dots) \quad (2.1)$$

a priraštaj energije pri prelasku iz stanja  $n$  u stanje  $n+1$  (tj. energija fonona):

$$E_{n+1} - E_n = \hbar\Omega \quad (2.2)$$

Energija fonona, preko  $\Omega = \sqrt{C/M}$ , zavisi od mase oscilatora  $M$  i konstante  $C$  koja karakteriše elastičnu silu oscilatora, a impuls mu je jednak  $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ . S obzirom da svaki atom prilikom oscilovanja trpi uticaje okolnih atoma i istovremeno i sam utiče na njihovo oscilovanje, fononi u kristalnim strukturama ne mogu se smatrati kvantima oscilovanja pojedinačnih atoma, već predstavljaju elementarna pobuđenja čitavog kristala.

### 2.1 Fononi u neograničenim strukturama

Potencijalna energija kristala na apsolutnoj nuli (tzv. zamrznuti kristal) data je izrazom:

$$W = \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}, \vec{m}} V(\vec{n} - \vec{m}) \quad (2.3)$$

pri čemu je  $V(\vec{n} - \vec{m})$  potencijal interakcije između dva atoma na mestima  $\vec{n}$  i  $\vec{m}$ . Ako se temperatura povisi, atomi počinju da osciluju tako da trenutni položaj atoma ne karakterišu više vektori  $\vec{n}$  i  $\vec{m}$ , već vremenski zavisni vektori

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

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

$$V(\vec{n} - \vec{m}) \equiv V_0(\vec{n} - \vec{m}) \rightarrow V \{ (\vec{n} - \vec{m}) + [\vec{u}(\vec{n}) - \vec{u}(\vec{m})] \} .$$

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

$$\begin{aligned} V \{ (\vec{n} - \vec{m}) + [\vec{u}(\vec{n}) - \vec{u}(\vec{m})] \} &= V_0(\vec{n} - \vec{m}) + \sum_{\alpha; \vec{n}, \vec{m}} \left[ \frac{\partial V(\vec{n} - \vec{m})}{\partial (\vec{n} - \vec{m})_\alpha} \right]_0 [u_\alpha(\vec{n}) - u_\alpha(\vec{m})] + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta; \vec{n}, \vec{m}} \left[ \frac{\partial^2 V(\vec{n} - \vec{m})}{\partial (\vec{n} - \vec{m})_\alpha \partial (\vec{n} - \vec{m})_\beta} \right]_0 [u_\alpha(\vec{n}) - u_\alpha(\vec{m})] [u_\beta(\vec{n}) - u_\beta(\vec{m})] + \dots \end{aligned} \quad (2.4)$$

( $\alpha$  i  $\beta$  označavaju moguće projekcije vektora na ose Dekartovog sistema). Svaki atom leži u nekoj potencijalnoj jami, pa iz uslova stabilnosti kristala sledi da je drugi sabirak s desne strane znaka jednakosti u izrazu (2.4) jednak nuli. Dakle, oscilovanje karakteriše samo treći sabirak u izrazu (2.4) - harmonijski član. Ako se ovaj član sumira po svim čvorovima i doda mu se kinetička energija  $\sum_{\alpha; \vec{n}} M \dot{u}_\alpha^2 / 2$ , dobija se oscilatorni hamiltonijan sistema:

$$H = \sum_{\alpha; \vec{n}} \frac{M}{2} \dot{u}_\alpha^2(\vec{n}) + \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta; \vec{n}, \vec{m}} C_{\alpha\beta}(\vec{n} - \vec{m}) [u_\alpha(\vec{n}) - u_\alpha(\vec{m})] [u_\beta(\vec{n}) - u_\beta(\vec{m})], \quad (2.5)$$

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

Pošto sile koje deluju između atoma u kristalu brzo opadaju sa porastom rastojanja  $|\vec{n} - \vec{m}|$  između atoma<sup>1</sup>, to se izraz za potencijalnu energiju može napisati na sledeći način:

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

Tada se izraz za potencijalnu energiju u (2.5) može napisati u aproksimaciji najbližih suseda, koja se sastoji u zameni sumiranja  $\vec{n}, \vec{m} \rightarrow \vec{n}, \vec{n} \pm \vec{\lambda}$ , gde  $\vec{\lambda}$  povezuje atom na mestu  $\vec{n}$  sa njegovim najbližim susedima. Kako je intenzitet  $\vec{\lambda}$  za sve najbliže susede isti (idealan kristal!), koeficijent  $C_{\alpha\beta}(\vec{\lambda})$  ne zavisi od  $\vec{\lambda}$ . Na taj način oscilatorni hamiltonijan sistema postaje:

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

## 2.2 Formiranje fononskog modela

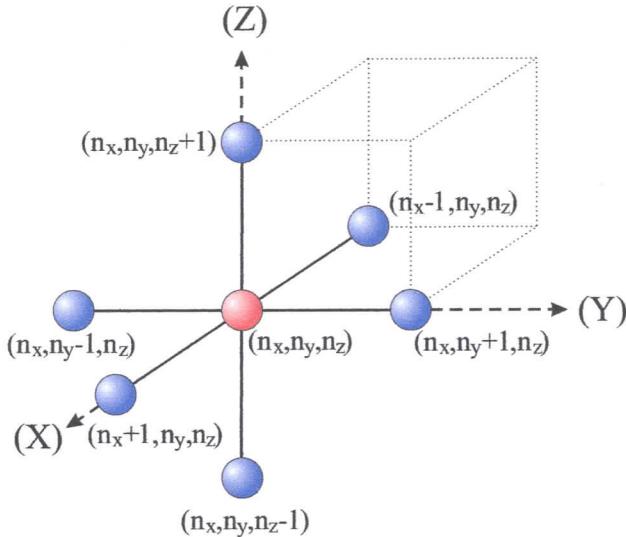
Mada u prirodi nema čistih izotropnih kristala, niti se oni mogu na današnjem nivou tehnologije proizvesti, izučavanje idealnih (beskonačnih) struktura korisno je zbog toga, što se za osnovne fizičke fenomene mogu izračunati njihove globalne karakteristike i dobiti ono što se naziva - kvalitativna slika, a zaključci dobijeni na taj način, kao i metodologija istraživanja, mogu se prenositi na neidealne strukture, a pre svega na kristalne strukture sa narušenom translacionom simetrijom. Idealne beskonačne strukture su kristali sa osobinom translacione invarijantnosti u tri uzajamno nekomplanarna pravca. Ovi pravci, koji se uvode u kristalografsku, ne moraju biti uzajamno ortogonalni, pa se zato u teorijskoj fizici kondenzovane materije uvodi dodatni Dekartov sistem. Ovde će biti posmatran samo kubni kristal kada su kristalografski uvedeni pravci uzajamno ortogonalni.

<sup>1</sup>Lenard-Džonsov potencijal koji je proporcionalan  $Ar^{-6} - Br^{-12}$ , najpogodniji je kod fonona u slučaju kovalentnih i molekulskih kristala

S obzirom na to, hamiltonijan sistema u aproksimaciji najbližih suseda (2.6) može da se napiše u obliku:

$$H = \sum_{\alpha; \vec{n}} \frac{p_{\alpha; \vec{n}}^2}{2M} + \frac{1}{4} \sum_{\alpha; \vec{n}, \vec{\lambda}} C_{\vec{n}, \vec{\lambda}}^{\alpha\alpha} (u_{\alpha; \vec{n}} - u_{\alpha; \vec{n} \pm \vec{\lambda}})^2, \quad (2.7)$$

gde je  $\vec{p} = M \dot{\vec{u}}$  - impuls atoma kristala, a  $M$  - masa tih atoma. Drugi sabirak sa desne strane znaka jednakosti predstavlja efektivni međuatomski potencijal interakcije ( $V_{eff}$ ).



**Slika 2.1:** Atom u okruženju najbližih suseda

Da bi se shvatio početak primene matematičkog formalizma priložena je slika 2.1, koja analitički prikazuje  $\vec{n}$ -ti atom kristala u okruženju svojih najbližih suseda. Radi jednostavnosti, pretpostavlja se da se radi o prostoj kubnoj strukturi sa jednim atomom po elementarnoj celiji (primitivna celija). Vidi se da  $|\vec{\lambda}|/a$  može jedino da uzme vrednosti:  $-1$  i  $1$ . U skladu sa svim ovim, izraz za fononski hamiltonijan može da se napiše u pogodnijoj (razvijenoj) formi:

$$H = T + V_{eff}, \quad (2.8)$$

pri čemu su:

$$T = \sum_{\alpha; \vec{n}} \frac{p_{\alpha; \vec{n}}^2}{2M}; \quad (2.9)$$

$$\begin{aligned} V_{eff} = & \sum_{\alpha; n_x, n_y, n_z} \frac{C_\alpha}{4} \left[ (u_{\alpha; n_x+1, n_y, n_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z})^2 + (u_{\alpha; n_x-1, n_y, n_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z})^2 + \right. \\ & + (u_{\alpha; n_x, n_y+1, n_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z})^2 + (u_{\alpha; n_x, n_y-1, n_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z})^2 + \\ & \left. + (u_{\alpha; n_x, n_y, n_z+1} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z})^2 + (u_{\alpha; n_x, n_y, n_z-1} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z})^2 \right]. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Torzione Hukove konstante  $C_{\alpha\beta}$  su zanemarene u odnosu na konstante istezanja  $C_\alpha \equiv C_{\alpha\alpha}$ , a operatori  $u_{\alpha\vec{n}}$  i  $p_{\alpha\vec{n}} = M\dot{u}_{\alpha\vec{n}}$  zadovoljavaju standardne komutacione relacije:

$$[u_{\alpha\vec{n}}, p_{\beta, \vec{m}}] = i\hbar \delta_{\alpha, \beta} \delta_{\vec{n}, \vec{m}}; \quad [u_{\alpha\vec{n}}, u_{\beta, \vec{m}}] = [p_{\alpha\vec{n}}, p_{\beta, \vec{m}}] = 0. \quad (2.11)$$

### 2.3 Zakon disperzije fonona

Energetski spektri i stanja, kao što je u uvodnom delu naglašeno, biće potraženi metodom Grinovih funkcija. U tu svrhu posmatra se dvovremenska temperaturska Grinova funkcija:

$$G_{\vec{n}, \vec{m}}^\alpha(t - t') \equiv \langle \langle u_{\alpha; \vec{n}}(t) | u_{\alpha; \vec{m}}(t') \rangle \rangle = \Theta(t - t') \langle [u_{\alpha; \vec{n}}(t), u_{\alpha; \vec{m}}(t')] \rangle_0. \quad (2.12)$$

Dvostrukim diferenciranjem ovog izraza po vremenu i neznatnim srednjanjem, dobija se:

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

Uzimanjem  $t' = 0$  i Furije transformacijom  $t \rightarrow \omega$  poslednji izraz prelazi u jednakost:

$$\int d\omega e^{-i\omega t} \left\{ \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{\vec{n}, \vec{m}} - M\omega^2 G_{\vec{n}, \vec{m}}^\alpha(\omega) - \frac{1}{i\hbar} \langle \langle [p_{\alpha; \vec{n}}, H] | u_{\alpha; \vec{m}} \rangle \rangle_\omega \right\} = 0,$$

koja je zadovoljena za:

$$-M\omega^2 G_{\vec{n},\vec{m}}^\alpha(\omega) = -\frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{\vec{n},\vec{m}} + \frac{1}{i\hbar} \langle\langle [p_{\alpha;\vec{n}}, H] \mid u_{\alpha;\vec{m}} \rangle\rangle_\omega. \quad (2.13)$$

Dalji postupak određivanja Grinovih funkcija  $G_{\vec{n},\vec{m}}^\alpha(\omega)$ , zahteva izračunavanje komutatora koji figurišu u višim Grinovim funkcijama  $\langle\langle \cdots \mid \cdots \rangle\rangle$  iz gornje jednačine.

$$\begin{aligned} [p_{\beta;m_x,m_y,m_z}, H] &= [p_{\beta;m_x,m_y,m_z}, T] + [p_{\beta;m_x,m_y,m_z}, V_{eff}] \equiv \\ &\equiv [p_{\beta;m_x,m_y,m_z}, V_{eff}] = \sum_{\alpha;n_x,n_y,n_z} \frac{C_\alpha}{4} \times \\ &\times \left\{ 2 [p_{\beta;m_x,m_y,m_z}, (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x+1,n_y,n_z})] (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x+1,n_y,n_z}) + \right. \\ &+ 2 [p_{\beta;m_x,m_y,m_z}, (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x-1,n_y,n_z})] (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x-1,n_y,n_z}) + \\ &+ 2 [p_{\beta;m_x,m_y,m_z}, (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y+1,n_z})] (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y+1,n_z}) + \\ &+ 2 [p_{\beta;m_x,m_y,m_z}, (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y-1,n_z})] (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y-1,n_z}) + \\ &+ 2 [p_{\beta;m_x,m_y,m_z}, (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,n_z+1})] (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,n_z+1}) + \\ &+ 2 [p_{\beta;m_x,m_y,m_z}, (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,n_z-1})] (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,n_z-1}) \} = \\ &= -i\hbar \sum_{\alpha;n_x,n_y,n_z} \frac{C_\alpha}{2} \delta_{\alpha\beta} [(\delta_{\vec{n},\vec{m}} - \delta_{n_x+1,m_x} \delta_{n_y,m_y} \delta_{n_z,m_z}) (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x+1,n_y,n_z}) + \\ &+ (\delta_{\vec{n},\vec{m}} - \delta_{n_x-1,m_x} \delta_{n_y,m_y} \delta_{n_z,m_z}) (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x-1,n_y,n_z}) + \\ &+ (\delta_{\vec{n},\vec{m}} - \delta_{n_x,m_x} \delta_{n_y+1,m_y} \delta_{n_z,m_z}) (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y+1,n_z}) + \\ &+ (\delta_{\vec{n},\vec{m}} - \delta_{n_x,m_x} \delta_{n_y-1,m_y} \delta_{n_z,m_z}) (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y-1,n_z}) + \\ &+ (\delta_{\vec{n},\vec{m}} - \delta_{n_x,m_x} \delta_{n_y,m_y} \delta_{n_z+1,m_z}) (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,n_z+1}) + \\ &+ (\delta_{\vec{n},\vec{m}} - \delta_{n_x,m_x} \delta_{n_y,m_y} \delta_{n_z-1,m_z}) (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,n_z-1})] = \\ &= -i\hbar C_\beta (6u_{\beta;m_x,m_y,m_z} - u_{\beta;m_x+1,m_y,m_z} - u_{\beta;m_x-1,m_y,m_z} - \\ &- u_{\beta;m_x,m_y+1,m_z} - u_{\beta;m_x,m_y-1,m_z} - u_{\beta;m_x,m_y,m_z+1} - u_{\beta;m_x,m_y,m_z-1}). \end{aligned}$$

Ovde su iskorišćene komutacione relacije za pomeraje i impulse (2.11), kao i definicija Kroekerovog simbola. Dalje, uzimajući u obzir:

$$G_{\vec{n},\vec{m}}^\alpha \equiv G_{n_x,n_y,n_z;m_x,m_y,m_z}^\alpha = \langle\langle u_{\alpha;n_x,n_y,n_z} \mid u_{\alpha;m_x,m_y,m_z} \rangle\rangle \quad (2.14)$$

i zamenom nađenih komutatora u jednačinu (2.13) sledi:

$$\begin{aligned} -M\omega^2 G_{n_x,n_y,n_z;m_x,m_y,m_z}^\alpha &= -\frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{n_x,m_x} \delta_{n_y,m_y} \delta_{n_z,m_z} - C_\alpha \left( 6 G_{n_x,n_y,n_z;m_x,m_y,m_z}^\alpha - \right. \\ &- G_{n_x+1,n_y,n_z;m_x,m_y,m_z}^\alpha - G_{n_x-1,n_y,n_z;m_x,m_y,m_z}^\alpha - G_{n_x,n_y+1,n_z;m_x,m_y,m_z}^\alpha - \\ &\left. - G_{n_x,n_y-1,n_z;m_x,m_y,m_z}^\alpha - G_{n_x,n_y,n_z+1;m_x,m_y,m_z}^\alpha - G_{n_x,n_y,n_z-1;m_x,m_y,m_z}^\alpha \right). \end{aligned} \quad (2.15)$$

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

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

na jednačinu (2.15), te nakon neznatnih algebarskih operacija, ona prelazi u:

$$\frac{M}{N} \sum_{\vec{k}} e^{-i(\vec{n}-\vec{m})\vec{k}} \left\{ \frac{i\hbar}{2\pi M} - G_{\vec{k}}^{\alpha}(\omega) \left[ \omega^2 + 2\frac{C_{\alpha}}{M} (3 - \cos a_x k_x - \cos a_y k_y - \cos a_z k_z) \right] \right\} = 0 .$$

Ova jednakost je ispunjena za:

$$\left[ \frac{\omega^2}{\Omega_{\alpha}^2} + 2 (\cos a_x k_x + \cos a_y k_y + \cos a_z k_z - 3) \right] G_{\vec{k}}^{\alpha}(\omega) = \frac{i\hbar}{2\pi C_{\alpha}} , \quad (2.16)$$

odnosno:

$$G_{\vec{k}}^{\alpha}(\omega) = \frac{i\hbar}{4\pi M \omega_{\alpha}(\vec{k})} \left[ \frac{1}{\omega - \omega_{\alpha}(\vec{k})} - \frac{1}{\omega + \omega_{\alpha}(\vec{k})} \right] . \quad (2.17)$$

Odavde se, očigledno, polovi Grinovih funkcija nalaze kada se imenioci izraza u uglastoj zagradi izjednače sa nulom. Rešavanjem tog uslova po  $\omega \equiv \omega_{\alpha}(\vec{k})$  dobija se traženi zakon disperzije fonona:

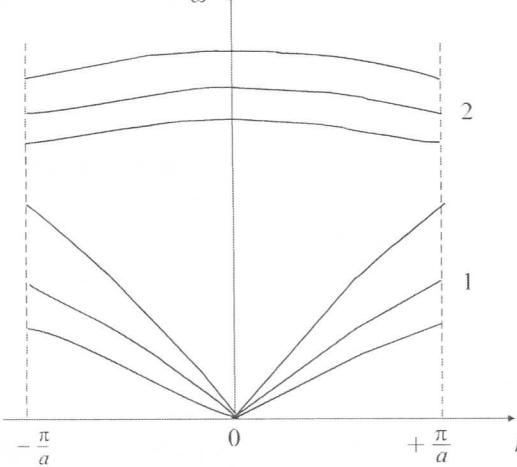
$$E_{\alpha}(\vec{k}) \equiv \hbar \omega_{\alpha}(\vec{k}) = 2 E_{\alpha} \sqrt{\sin^2 \frac{a_x k_x}{2} + \sin^2 \frac{a_y k_y}{2} + \sin^2 \frac{a_z k_z}{2}} , \quad (2.18)$$

gde je  $E_{\alpha} = \hbar \Omega_{\alpha} = \hbar \sqrt{C_{\alpha}/M}$ . Zbog poređenja ove relacije sa odgovarajućom za film strukture, zgodno ju je napisati u sledećoj (bezdimenzionoj) formi:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{\alpha}(\vec{k}) &= 2 \sqrt{\mathcal{R}(k_x k_y) + \mathcal{S}(k_z)} ; & \mathcal{E}_{\alpha}(\vec{k}) &\equiv \frac{E_{\alpha}(\vec{k})}{E_{\alpha}} ; \\ \mathcal{R}(k_x k_y) &= \sin^2 \frac{a_x k_x}{2} + \sin^2 \frac{a_y k_y}{2} ; & \mathcal{S}(k_z) &= \sin^2 \frac{a_z k_z}{2} . \end{aligned} \quad (2.19)$$

U aproksimaciji malih talasnih vektora  $k$  ( $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}$ ) i obeležavanjem:  $a = a_x = a_y = a_z$ , poslednja relacija se svodi na:

$$\mathcal{E}_{\alpha}(\vec{k}) = a k ,$$



Slika 2.2: Akustičke (1) i optičke (2) fononske grane

što predstavlja tipičan i poznat izraz za zakon disperzije akustičkih fonona.

Kvanti mehaničkih pobuđenja sa linearnim zakonom disperzije, tj. osobinom

$$\lim_{k \rightarrow 0} \omega_{\alpha}(\vec{k}) = 0 ,$$

nazivaju se **akustičkim fononima**. Analizom kristala složene strukture (sa  $\sigma$  podrešetki) dobija se  $3\sigma$  dozvoljenih frekvencija, od kojih tri uvek teže nuli kada  $k \rightarrow 0$  (akustički fononi), dok preostalih  $3\sigma - 3$  frekvencija zadovoljavaju uslov  $\lim_{k \rightarrow 0} \omega_{\alpha}(\vec{k}) \neq 0$ .

Mehaničke oscilacije sa ovom osobinom nazivaju se **optičkim fononima**.

## 2.4 Gustina fononskih stanja

Funkcija spektralne gustine fonona daje raspodelu broja fonona sa različitim energijama na skali frekvencije:

$$\mathcal{D}_\alpha(\omega) \equiv \frac{dn_\alpha}{d\omega} , \quad \mathcal{D}(\omega) = \sum_{\alpha=1}^{3\sigma} \mathcal{D}_\alpha(\omega) , \quad (2.20)$$

gde je  $n_\alpha$  broj stanja u svim granama spektra (akustičkim i optičkim) za datu frekvenciju, a  $V$  zapremina. U opštem slučaju, ova funkcija se može izraziti kao:

$$\mathcal{D}(\omega) = V \sum_{\alpha=1}^{3\sigma} \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \delta(\omega - \omega_\alpha(\vec{k})) = V \sum_{\alpha=1}^{3\sigma} \int \frac{dS}{(2\pi)^3} \frac{1}{|\nabla \omega_\alpha(\vec{k})|} , \quad (2.21)$$

gde se poslednji integral uzima po površini I Briluenove zone, na kojoj je  $\omega_\alpha(\vec{k}) = \text{const}$ . Gustina stanja se može izračunati ako je poznat zakon disperzije  $\omega = \omega_\alpha(\vec{k})$ . Tačke u kojima je grupna brzina  $v_g = |\nabla \omega_\alpha(\vec{k})|$  jednaka nuli nazivaju se Van Hofovi singulariteti. U tim tačkama dolazi do pojave pikova na krivoj  $\mathcal{D}(\omega)$ .

Gustina fononskih stanja se može izračunati i metodom Grinovih funkcija, a definiše se preko:

$$\mathcal{D}_{\vec{k}}(\omega) = M\hbar^{-1} \sum_{\vec{k}} g_{\vec{k}}(\omega) ,$$

gde je  $g_{\vec{k}}(\omega)$  spektralna funkcija Grinove funkcije. Ona se može izraziti kao:

$$g_{\vec{k}}(\omega) = 2 \operatorname{Re} \left\{ G_{\vec{k}}^\alpha(\omega + i\varepsilon) \right\} = \frac{\hbar}{2M\omega_{\vec{k}}^\alpha} \left[ \delta(\omega - \omega_{\vec{k}}^\alpha) - \delta(\omega + \omega_{\vec{k}}^\alpha) \right]$$

i normira se na sledeći način:

$$\int_0^{\omega_{D/A}} d\omega \mathcal{D}_{\vec{k}}(\omega) = 1 ,$$

gde  $\omega_{D/A}$  predstavlja Debajevu ili Ajnštajnovu frekvenciju.

## 2.5 Fononska termodinamika

Mehaničke, magnetne i dielektrične osobine kristalnih supstanci u velikoj meri zavise od temperature. Najočigledniji primer materijala kod kojih se električne osobine drastično menjaju sa temperaturom nalazimo kod poluprovodnika, usled čega je za nesmetan rad visoko integrisanih elektronskih sklopova od suštinskog značaja odvođenje Džulove toplotne. U cilju određivanja osobina i mogućnosti primene pojedinih materijala neophodno je znati odakle potiče ova toplotna, kako je materijal prima (tj. kolika mu je toplotna kapacitivnost) i kako se toplota prostire kroz materijal (tj. kolika mu je toplotna provodnost).

Termičke osobine kristalnih supstanci razjašnjene su – barem u opštim crtama – tek u prvim decenijama dvadesetog veka primenom kvantne mehanike. Kao što je već ranije spomenuto, kristal se može posmatrati kao sistem međusobno povezanih oscilatora. Pomeraj jednog čvora kristalne rešetke izaziva dejstvo sile na susedne čvorove, a time i njihov pomak. Na taj način se kroz kristal prostire deformacija. Ako je uzrok njenog širenja oscilatorno kretanje, deformacija će biti periodična, tj. kroz kristal će se širiti talasno kretanje. S obzirom na talasno-korpuskularni dualizam, ovim talasima mogu se pridružiti čestična obeležja, tj. fononi odgovarajućih energija. Ukupna unutrašnja (toplotna) energija kristala nalazi se u fononima. Pri toplotnom pobuđenju

kristala (tj. zagrevanju) njihov broj se povećava, tj. povišenje energije kristala za  $\hbar\omega$  znači pojavu jednog fonona.

Toplotna kapacitivnost kristalne rešetke<sup>2</sup> definiše se kao:

$$C_b \equiv \left( \frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = T \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_V , \quad (2.22)$$

gde je  $U$  unutrašnja energija kristala,  $S$  – odgovarajuća entropija, a  $T$  – temperatura.

Termodinamičko ponašanje gotovo svih karakteristika kristala određuju fononi, usled čega je neophodno proceniti njihov udeo u ukupnoj toplotnoj kapacitivnosti čvrstog tela, odnosno toplotnoj kapacitivnosti posmatrane kristalne strukture (jer se obračun vrši po elementarnoj ćeliji datog kristala).

Energija sistema oscilatora različitih frekvencija  $\omega(\vec{k})$  koji se nalaze u stanju termodinamičke ravnoteže, data je sa:

$$U = \sum_{\vec{k}} \langle n_{\vec{k}} \rangle \hbar \omega_{\vec{k}} ,$$

gde je svako  $\langle n_{\vec{k}} \rangle$  odgovarajućom funkcijom raspodele povezano sa  $\omega_{\vec{k}}$ . Sumu u ovoj relaciji često je pogodno zamjeniti integralom: ako se prepostavi da kristal poseduje  $\mathcal{D}(\omega)d\omega$  vibracija u frekventnom intervalu od  $\omega$  do  $\omega + d\omega$ , tada je:

$$U = \int d\omega \mathcal{D}(\omega) \langle n(\omega, T) \rangle \hbar \omega ; \langle n \rangle = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1} ,$$

gde je  $\mathcal{D}$  fononska gustina stanja definisana relacijom (2.21). Toplotna kapacitivnost se određuje diferenciranjem  $\langle n(\omega, T) \rangle$  po temperaturi, ali je prethodno neophodno pronaći fononsku gustinu stanja po jediničnom intervalu frekvencija  $\mathcal{D}(\omega)$ .

Prepostavimo da sve tri akustične grane spektra karakteriše u dugotalasnoj aproksimaciji linearni zakon disperzije  $\omega_{\alpha}(k) = v \cdot k$ . Ova relacija važi u izotropnom elastičnom kontinuumu. Da bi ona ostala na snazi i u kristalu koji poseduje karakterističnu atomsku strukturu, neophodno je da talasna dužina zvučnih talasa bude mnogo veća od međuatomskog rastojanja ( $\lambda \gg a$ ). S obzirom na vezu između talasne dužine i talasnog broja u obliku:

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} ,$$

sledi da se Debajeva aproksimacija uspešno primenjuje na niskofrekventne oscilatore, odnosno u oblasti malih talasnih vektora. Smatrujući, takođe, da talasni vektori fonona leže u sferi radijusa  $k_D$ , a ne u I Briluenovoj zoni, izraz (2.21) dobija jednostavniji oblik:

$$\mathcal{D}_D(\omega) = \frac{3V}{(2\pi)^3} \int_0^{\pi} \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{k_D} k^2 dk \delta(\omega - vk) = \begin{cases} \frac{3V}{2\pi^2} \frac{\omega^2}{\bar{v}^3}, & \text{za } \omega < \omega_D , \\ 0, & \text{za } \omega > \omega_D , \end{cases} \quad (2.23)$$

gde je<sup>3</sup>:  $3\bar{v}^{-3} = v_{\ell}^{-3} + 2v_t^{-3}$ , a  $\omega_D$  – Debajeva frekvencija, koja se određuje preko maksimalne vrednosti talasnog vektora u prvoj Briluenovoj zoni. Ako posmatrani uzorak sadrži  $N$  elementarnih ćelija, tada je ukupni broj stanja akustičkih fonona jednak  $N$ , a Debajeva frekvencija se

<sup>2</sup>Pod ovim pojmom obično se podrazumeva toplotna kapacitivnost pri konstantnoj zapremini. Indeks „ $b$ “ ukazuje na to da se radi o balku, odnosno neograničenoj kristalnoj strukturi.

<sup>3</sup>Uzimamo u obzir da se pored longitudinalnog mogu javiti i dva međusobno normalna transverzalna talasa i da njihove brzine – u opštem slučaju – ne moraju biti iste. Iz tog razloga uvodimo srednju brzinu definisanu relacijom:

$$\frac{3}{\bar{v}^3} = \sum_{i=1}^3 \frac{1}{v_i^3}$$

određuje iz uslova normiranja:

$$N = \int_0^{\omega_D} \mathcal{D}_D(\omega) d\omega = \frac{V\omega_D^3}{6\pi^2 v^3} = \frac{Na^3 \omega_D^3}{6\pi^2 v^3}$$

(broj čvorova rešetke jednak je broju fononskih stanja). odakle je:

$$\omega_D = \frac{\sqrt[3]{6\pi^2}}{a} \cdot v . \quad (2.24)$$

Maksimalna vrednost talasnog vektora u I Briluenovoj zoni (Debajev talasni vektor) može se odrediti na osnovu prethodno uvedene aproksimacije da talasni vektori fonona leže u sferi radiusa  $k_D$ , na osnovu čega proizilazi:

$$V = \left\{ \begin{array}{l} \frac{4}{3} \pi \left( ak_D^b \right)^3 \\ a^3 \Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z \end{array} \right. ; \quad k_{x/y/z} \in \left[ -\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a} \right] \Rightarrow \Delta k_x = \Delta k_y = \Delta k_z = \frac{2\pi}{a} ,$$

te je:

$$\frac{4}{3} \pi \left( ak_D^b \right)^3 = a^3 \Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z = 8\pi^3 \Rightarrow k_D^b = \frac{\sqrt[3]{6\pi^2}}{a} . \quad (2.25)$$

Upoređivanjem gornjih jednačina zaključujemo da je:

$$\omega_D = k_D^b \cdot v .$$

Preko Debajeve frekvencije uvodi se i njoj odgovarajuća Debajeva temperatura pomoći relacije:

$$k_B T_D = \hbar \omega_D ,$$

gdje je  $k_B$  Boltzmanova konstanta, odakle je:

$$T_D = \frac{\hbar \omega_D}{k_B} = \frac{\hbar v k_D}{k_B} = \frac{\pi \sqrt{3} \hbar v}{a k_B} . \quad (2.26)$$

Procena reda veličine Debajeve temperature može se dobiti uzimajući da je  $k_D \sim 10^8 \text{ cm}^{-1}$  i  $\omega_D \sim 10^{13} \text{ s}^{-1}$ , na osnovu čega sledi:  $T_D \sim 10 \text{ K}$ . Debajeve temperature ( $T < 10 \text{ K}$ ) su takve da se može pretpostaviti da akustičke grane poseduju energije proporcionalne talasnom vektoru:

$$\hbar \omega_\alpha(\vec{k}) = \hbar v_\alpha k \quad \text{za} \quad ak_{max} \approx 0,1 ,$$

gde je  $v_\alpha$  – brzina zvuka odgovarajuće grane oscilovanja, reda veličine  $v_\alpha \sim (10^3 \div 10^5) \text{ m/s}$ , ako je  $a \approx 10^{-10} \text{ m}$ .

Prema (2.23), unutrašnja energija je sada:

$$U = \int d\omega \mathcal{D}(\omega) \langle n(\omega, T) \rangle \hbar \omega = \int_0^{\omega_D} d\omega \left( \frac{\omega^2 V}{2\pi^2 v^3} \right) \left( \frac{\hbar \omega}{e^{\frac{\hbar \omega}{k_B T}} - 1} \right) .$$

Ako se – radi jednostavnosti – pretpostavi da je fononska brzina nezavisna od polarizacije, prethodni izraz množi se faktorom 3 i dobija:

$$U = 9Nk_B T \left( \frac{T}{T_D} \right)^3 \int_0^{x_D} \frac{x^3}{e^x - 1} dx , \quad (2.27)$$

gde je  $N$  – broj atoma u datom uzorku,  $x = \frac{\hbar\omega}{k_B T}$  i  $x_D = \frac{T_D}{T}$ .

U granicama niskih temperatura, kada  $x_D \rightarrow \infty$ , vrednost integrala u relaciji (2.27) uzima se iz tablica integrala [10]:

$$\int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^4}{15},$$

pa je:

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

te se za toplotnu kapacitivnost dobija izraz:

$$C_b = \frac{12\pi^4}{5} N k_B \left( \frac{T}{T_D} \right)^3, \quad (2.28)$$

tj. toplotna kapacitivnost pri niskim temperaturama srazmerna je trećem stepenu temperature, što je u saglasnosti sa eksperimentalnim rezultatima i predstavlja tzv. Debajev  $T^3$  zakon. U cilju upoređivanja ove vrednosti sa vrednostima dobijenim za film-strukture, superrešetke i kvantne žice, pogodno je toplotnu kapacitivnost obračunati po jednoj elementarnoj ćeliji kristala:

$$C_b^* = \frac{1}{N} \frac{\partial U}{\partial T},$$

na osnovu čega se iz (2.28) dobija:

$$C_b^* = \frac{12\pi^4}{5} k_B \left( \frac{T}{T_D} \right)^3 \equiv C_0 \cdot T^3, \quad (2.29)$$

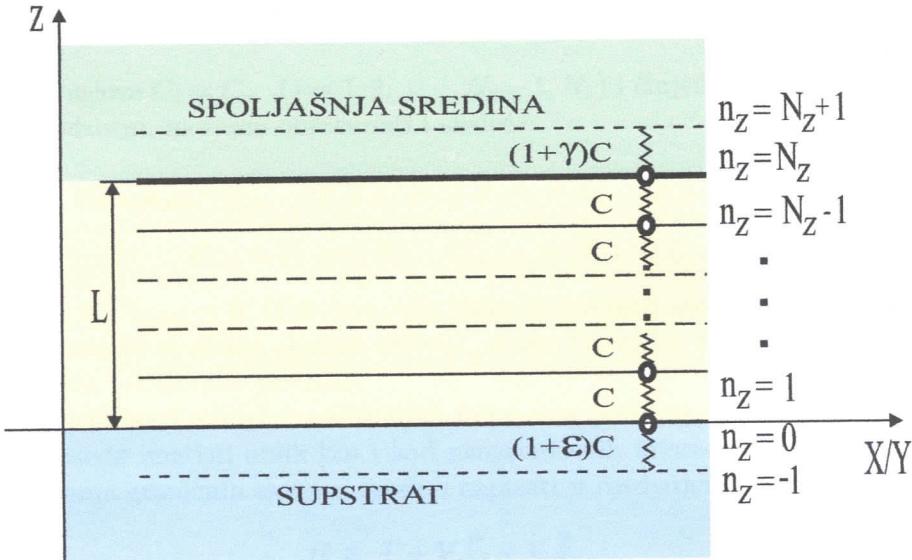
gdje je:  $C_0 = \frac{12\pi^4}{5} k_B$ , a  $T = \frac{T}{T_D}$ .

Jednostavnost Debajevog prilaza sastoji se u tome da se ceo termodinamički aspekt fonona u kristalu izražava preko jednog parametra  $\theta_D = k_B T_D$ . Debajeva temperatura igra važnu ulogu u teoriji oscilacija kristalne rešetke i eksperimentalno se određuje merenjem toplotne kapacitivnosti na niskim temperaturama. Ona odvaja niskotemperatursku oblast, gde se mora koristiti kvantna statistika, od visokotemperaturske gde važi i klasična statistička mehanika. Za različita tela  $\theta_D$  je različita, ali sva tela pokazuju istu zavisnost toplotne kapacitivnosti i entropije od redukovane temperature  $T/T_D$ .

Uprkos aproksimacijama, ova – Debajeva teorija se slaže sa eksperimentima. Pri niskim temperaturama specifična toplotna kapacitivnost i entropija se ponašaju  $\sim T^3$ . Time je kvantna teorija objasnila odstupanje klasične teorije od eksperimenta.

### 3 Fononi u kristalnim filmovima

Tanki kristalni filmovi predstavljaju ograničene kristalne strukture kod kojih se uslovi na granicama razlikuju od onih u unutrašnjosti, tj. translaciona simetrija narušena je duž pravca normalnog na film ( $z$ -pravac).



Slika 3.1: Poprečni presek (u  $X/Y - Z$  ravni) modela kristalnog filma

Ako unutar filma (između graničnih površina) nema nikakvih deformacija (narušenja) kristalne strukture (kristalna rešetka je bez primesa, vakancija i sl.), onda se on naziva idealnim filmom. U suprotnom, ako ove deformacije postoje (npr. kao posledice dopingovanja stranim atomima), tada se ta struktura naziva deformisanim filmom.

#### 3.1 Analiza fononskog modela

Posmatra se idealni<sup>4</sup> tanki film kubne kristalne strukture načinjen na supstratu nekim tehničko-tehnološkim postupkom (naparavanjem, spaterovanjem i sl.), čiji su osnovni kristalografski podaci:

$$a_x = a_y = a_z = a ; \quad N_{x,y} \sim 10^8 \gg N_z \sim 10 ;$$

$$C_{\vec{n},\vec{m}}^{\alpha,\beta} = C_{\vec{n},\vec{m}}^{\alpha,\alpha} = C_{\vec{n},\vec{n} \pm \vec{\lambda}}^{\alpha} = C_{\vec{n},\vec{n} \pm \vec{\lambda}} = C_{n_z,n_z \pm 1} ;$$

$$C_{N_z,N_{z+1}} = C_{N_{z+1},N_z} = (1 + \gamma)C , \quad C_{-1,0} = C_{0,-1} = (1 + \varepsilon)C ; \quad \varepsilon, \gamma \geq -1 ,$$

gde je  $n_z$  - indeks rešetke duž  $z$ -pravca i  $n_z \in (0, 1, 2, \dots, N_z)$ . Na osnovu toga, o modelu se može zaključiti sledeće.

1. Kristalni film poseduje dve beskonačne granične površine paralelne  $XY$  - ravnima i to za  $z = 0$  i  $z = L$ , dok u  $z$  - pravcima ima konačnu debljinu ( $L$ ).
2. Duž  $z$  - ose locirano je  $N_z + 1$  atoma.
3. Torzione konstante  $C^{\alpha\beta}$  zanemarljive su u odnosu na konstante istezanja  $C_\alpha$ .

<sup>4</sup>Pojam - idealni, koristi se u smislu nenarušenja kristalne strukture (bez prisustva defekata, primesa i sl.), a ne u smislu njene prostorne neograničenosti.

4. Smatra se da atomi, koji pripadaju graničnim slojevima prikazanog tankog filma, interaguju sa spoljašnjom sredinom, bez obzira na to što duž  $z$ -pravaca iznad gornje i ispod donje granične površine nema atoma (motiva, čvorova) filma, ali su granični atomi „spregnuti” izmenjenim Hukovim silama za atome sredine, odnosno supstrata. U skladu sa napred navedenim uslovima, konstante elastičnosti koje opisuju interakciju atoma graničnih površina sa spoljašnjim sredinama (supstrat i npr. vazduh), modifikovane su odgovarajućim koeficijentima  $\varepsilon$  i  $\gamma$ .

Uzimajući u obzir uslove  $C_j = C$ , ( $j = 1, 2, \dots, N_z - 1, N_z$ ) i činjenicu da su slojevi za  $n_z \leq -1$  i za  $n_z \geq N_z + 1$  odsutni, moramo obračunati i sledeće:

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

$$C_{-1} = (1 + \varepsilon) C ; \quad C_{N_z+1} = (1 + \gamma) C .$$

Kada bi bilo:  $C_{-1} = C_{N_z+1} = 0$  ( $\varepsilon = \gamma = -1$ ), tada bi granični atomi za  $n_z = 0$  i  $n_z = N_z$  bili „zamrznuti”, tj. javio bi se efekat „krutih zidova”, a ako bi važilo:  $C_{-1} = C_{N_z+1} = C$  ( $\varepsilon = \gamma = 0$ ), bio bi to efekat „slobodnih površina”.

S obzirom na definisani model, hamiltonijan fononskog podsistema opisanog filma u aproksimaciji najbližih suseda ima isti oblik kao i kod neograničenih kristala - izrazi (2.8) – (2.10), ali ga je, zbog postojanja graničnih slojeva, zgodno napisati u razdvojenom vidu:

$$H \equiv T + V_{eff}^P + V_{eff}^Z , \quad (3.1)$$

gde je  $T$  - standardan kinetički član. Potencijal koji uključuje interakcije sa graničnim slojevima je oblika:

$$\begin{aligned} V_{eff}^P &= \sum_{\alpha;n_x,n_y} \frac{C_\alpha}{4} \left[ 2 (1 + \varepsilon) (u_{\alpha;n_x,n_y,0})^2 + 2 (1 + \gamma) (u_{\alpha;n_x,n_y,N_z})^2 + \right. \\ &\quad + 2 (u_{\alpha;n_x,n_y,1} - u_{\alpha;n_x,n_y,0})^2 + 2 (u_{\alpha;n_x,n_y,N_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,N_z-1})^2 + \\ &\quad + (u_{\alpha;n_x+1,n_y,0} - u_{\alpha;n_x,n_y,0})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,n_y,0} - u_{\alpha;n_x,n_y,0})^2 + \\ &\quad + (u_{\alpha;n_x,n_y+1,0} - u_{\alpha;n_x,n_y,0})^2 + (u_{\alpha;n_x,n_y-1,0} - u_{\alpha;n_x,n_y,0})^2 + \\ &\quad + (u_{\alpha;n_x+1,n_y,N_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,N_z})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,n_y,N_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,N_z})^2 + \\ &\quad \left. + (u_{\alpha;n_x,n_y+1,N_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,N_z})^2 + (u_{\alpha;n_x,n_y-1,N_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,N_z})^2 \right] . \end{aligned} \quad (3.2)$$

Potencijal sa interakcijama koje obuhvataju unutrašnje slojeve je onda sledećeg oblika:

$$\begin{aligned} V_{eff}^Z &= \sum_{\alpha;n_x,n_y} \frac{C_\alpha}{4} \left\{ \sum_{n_z=1}^{N_z-1} \left[ (u_{\alpha;n_x+1,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,n_z})^2 + (u_{\alpha;n_x-1,n_y,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,n_z})^2 + \right. \right. \\ &\quad + (u_{\alpha;n_x,n_y+1,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,n_z})^2 + (u_{\alpha;n_x,n_y-1,n_z} - u_{\alpha;n_x,n_y,n_z})^2 \left. \right] + \\ &\quad \left. + \sum_{n_z=1}^{N_z-2} (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z+1} - u_{\alpha;n_x,n_y,n_z})^2 + \sum_{n_z=2}^{N_z-1} (u_{\alpha;n_x,n_y,n_z-1} - u_{\alpha;n_x,n_y,n_z})^2 \right\} . \end{aligned} \quad (3.3)$$

Zakon disperzije fonona i u ovom slučaju se nalazi, kao i u prethodnoj glavi, metodom Grinovih funkcija, tražeći Grinovu funkciju istog oblika kao i (2.12) pomoću jednačine kretanja (2.13). Za razliku od (jednostavnije) situacije za idealne strukture, ovde se moraju izračunati odgovarajući komutatori, odnosno odrediti Grinove funkcije posebno za atome graničnih slojeva, a posebno

za atome iz unutrašnjosti filma. Koristeći u prethodnoj glavi navedene standardne komutacione relacije za pomeraje i impulse atoma (2.11), kao i ostale neophodne osnovne definicije, izračunavaju se potrebni komutatori impulsa i hamiltonijana.

Za donju graničnu površinu za koju je  $m_z = 0$ :

$$\begin{aligned} [p_{\beta;m_x,m_y,0}, H] &= -i\hbar C_\alpha [(6 + \varepsilon) u_{\beta;m_x,m_y,0} - \\ &- u_{\beta;m_x,m_y,1} - u_{\beta;m_x+1,m_y,0} - \\ &- u_{\beta;m_x-1,m_y,0} - u_{\beta;m_x,m_y+1,0} - u_{\beta;m_x,m_y-1,0}] , \end{aligned} \quad (3.4)$$

za  $1 \leq m_z \leq N_z - 1$ ,

$$\begin{aligned} [p_{\beta;m_x,m_y,m_z}, H] &= -i\hbar C_\alpha (6 u_{\beta,m_x,m_y,m_z} - \\ &- u_{\beta,m_x+1,m_y,m_z} - u_{\beta,m_x-1,m_y,m_z} - u_{\beta,m_x,m_y+1,m_z} - \\ &- u_{\beta,m_x,m_y-1,m_z} - u_{\beta,m_x,m_y,m_z+1} - u_{\beta,m_x,m_y,m_z-1}) \end{aligned} \quad (3.5)$$

i konačno, za gornju graničnu površinu za koju je  $m_z = N_z$ , dobijamo:

$$\begin{aligned} [p_{\beta;m_x,m_y,N_z}, H] &= -i\hbar C_\alpha [(6 + \gamma) u_{\beta;m_x,m_y,N_z} - \\ &- u_{\beta;m_x,m_y,N_z-1} - u_{\beta;m_x+1,m_y,N_z} - \\ &- u_{\beta;m_x-1,m_y,N_z} - u_{\beta;m_x,m_y+1,N_z} - u_{\beta;m_x,m_y-1,N_z}] . \end{aligned} \quad (3.6)$$

Zamenom nađenih komutatora u (2.13) i preimenovanjem  $\beta \rightarrow \alpha$ ;  $m \rightarrow n$ , dobija se:

- za  $n_z = 0$ ,

$$\begin{aligned} &- M\omega^2 G_{n_x,n_y,0;m_x,m_y,m_z}^\alpha = -\frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{n_x,m_x} \delta_{n_y,m_y} \delta_{0,m_z} - \\ &- C_\alpha [(6 + \varepsilon) G_{n_x,n_y,0;m_x,m_y,m_z}^\alpha - G_{n_x,n_y,1;m_x,m_y,m_z}^\alpha - G_{n_x+1,n_y,0;m_x,m_y,m_z}^\alpha - \\ &- G_{n_x-1,n_y,0;m_x,m_y,m_z}^\alpha - G_{n_x,n_y+1,0;m_x,m_y,m_z}^\alpha - G_{n_x,n_y-1,0;m_x,m_y,m_z}^\alpha] , \end{aligned} \quad (3.7)$$

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

$$\begin{aligned} &- M\omega^2 G_{n_x,n_y,n_z;m_x,m_y,m_z}^\alpha = -\frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{n_x,m_x} \delta_{n_y,m_y} \delta_{n_z,m_z} - \\ &- C_\alpha (6 G_{n_x,n_y,n_z;m_x,m_y,m_z}^\alpha - G_{n_x+1,n_y,n_z;m_x,m_y,m_z}^\alpha - G_{n_x-1,n_y,n_z;m_x,m_y,m_z}^\alpha - \\ &- G_{n_x,n_y+1,n_z;m_x,m_y,m_z}^\alpha - G_{n_x,n_y-1,n_z;m_x,m_y,m_z}^\alpha - G_{n_x,n_y,n_z+1;m_x,m_y,m_z}^\alpha - G_{n_x,n_y,n_z-1;m_x,m_y,m_z}^\alpha) , \end{aligned} \quad (3.8)$$

- za  $n_z = N_z$ ,

$$\begin{aligned} &- M\omega^2 G_{n_x,n_y,N_z;m_x,m_y,m_z}^\alpha = -\frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{n_x,m_x} \delta_{n_y,m_y} \delta_{N_z,m_z} - \\ &- C_\alpha [(6 + \gamma) G_{n_x,n_y,N_z;m_x,m_y,m_z}^\alpha - G_{n_x,n_y,N_z-1;m_x,m_y,m_z}^\alpha - G_{n_x+1,n_y,N_z;m_x,m_y,m_z}^\alpha - \\ &- G_{n_x-1,n_y,N_z;m_x,m_y,m_z}^\alpha - G_{n_x,n_y+1,N_z;m_x,m_y,m_z}^\alpha - G_{n_x,n_y-1,N_z;m_x,m_y,m_z}^\alpha] . \end{aligned} \quad (3.9)$$

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

$$G_{n_x,n_y,n_z;m_x,m_y,m_z}^\alpha \equiv G_{\vec{n},\vec{m}}^\alpha(\omega) = \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x,k_y} e^{-ia[(n_x-m_x)k_x + (n_y-m_y)k_y]} G_{n_z,m_z}^\alpha(k_x, k_y; \omega) \quad (3.10)$$

na sistem jednačina (3.7) – (3.9), i nakon istovetnih algebarskih operacija koje su iskorisćene na odgovarajućem mestu u prethodnoj glavi, dolazi se do relacija na osnovu kojih se može uspostaviti sledeći sistem algebarskih diferencijalnih jednačina:

$$\begin{aligned}
 (\varrho_k^\alpha - \varepsilon) G_{0,m_z}^\alpha + G_{1,m_z}^\alpha &= \mathcal{K} \delta_{0,m_z} \\
 G_{0,m_z}^\alpha + \varrho_k^\alpha G_{1,m_z}^\alpha + G_{2,m_z}^\alpha &= \mathcal{K} \delta_{1,m_z} \\
 G_{1,m_z}^\alpha + \varrho_k^\alpha G_{2,m_z}^\alpha + G_{3,m_z}^\alpha &= \mathcal{K} \delta_{2,m_z} \\
 &\vdots \\
 G_{n_z-1,m_z}^\alpha + \varrho_k^\alpha G_{n_z,m_z}^\alpha + G_{n_z+1,m_z}^\alpha &= \mathcal{K} \delta_{n_z,m_z} \\
 &\vdots \\
 G_{N_z-3,m_z}^\alpha + \varrho_k^\alpha G_{N_z-2,m_z}^\alpha + G_{N_z-1,m_z}^\alpha &= \mathcal{K} \delta_{N_z-2,m_z} \\
 G_{N_z-2,m_z}^\alpha + \varrho_k^\alpha G_{N_z-1,m_z}^\alpha + G_{N_z,m_z}^\alpha &= \mathcal{K} \delta_{N_z-1,m_z} \\
 G_{N_z-1,m_z}^\alpha + (\varrho_k^\alpha - \gamma) G_{N_z,m_z}^\alpha &= \mathcal{K} \delta_{N_z,m_z}
 \end{aligned} \tag{3.11}$$

gde su:  $G_{n_z,m_z}^\alpha \equiv G_{n_z,m_z}(k_x, k_y; \omega)$ ,  $\mathcal{K} = \frac{i\hbar}{2\pi C_\alpha}$ ,  $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$  i

$$\varrho_k^\alpha = \frac{\omega^2}{\Omega_\alpha^2} - 4 \sin^2 \frac{ak_x}{2} - 4 \sin^2 \frac{ak_y}{2} - 2 \equiv \varrho. \tag{3.12}$$

Sistem jednačina (3.11) ima rešenja koja mogu da se prikažu u obliku  $G_{a,b} = D_a / D$ , gde je  $D_a$  odgovarajuća zamenska, a  $D$  determinanta sistema (obe kvadratne):

$$D_{N_z+1}(\varrho) = \begin{vmatrix} \varrho - \varepsilon & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & \varrho & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \varrho & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \varrho & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & \varrho & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & \varrho - \gamma \end{vmatrix}_{N_z+1} \tag{3.13}$$

### 3.2 Spektri fonona u filmu

U skladu sa osnovnim zadatkom ovog istraživanja, a to je određivanje spektra dozvoljenih fononskih energija, koji se dobija iz (3.12) i na osnovu osobina Grinovih funkcija, potrebno je da se odrede polovi traženih Grinovih funkcija. Jasno je da se ovo svodi na određivanje korena (nula) determinante (3.13), odnosno rešavanje jednakosti:

$$D_{N_z+1}(\varrho; \varepsilon, \gamma) \equiv 0 \implies \varrho = \varrho_\nu(\varepsilon, \gamma); \quad \nu = 1, 2, 3, \dots, N_z + 1. \tag{3.14}$$

Ovaj zadatak u opštem slučaju nije analitički rešiv (može se rešiti numerički za zadate parametre:  $\varepsilon$ ,  $\gamma$  i  $N_z$ ).

U slučaju modela slobodnih površina, kada su:  $\varepsilon = \gamma = 0$ , ovaj problem ima analitičko rešenje:

$$D_{N_z+1}(\varrho) = \varrho \mathcal{P}_{N_z}(\varrho) - \mathcal{P}_{N_z-1}(\varrho) \equiv \mathcal{P}_{N_z+1}(\varrho). \tag{3.15}$$

Determinanta (3.13) sistema jednačina (3.11) se izražava direktno preko karakterističnih polinoma Čebiševa reda  $N_z$ . Iz uslova (3.14) slede nule Čebiševljevih polinoma, a uzimajući u obzir i izraz

(3.12), jednostavnim algebarskim transformacijama dolazi se do izraza koji daje zakon disperzije fonona u tankom (strukturno nedeformisanom) filmu:

$$\mathcal{E}_\nu^\alpha(\vec{k}) \equiv \frac{\omega_\nu^\alpha(\vec{k})}{\Omega_\alpha} = 2 \sqrt{R(k_x, k_y) + S_\nu(k_z)} ; \quad (3.16)$$

$$R(k_x, k_y) \equiv \sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y}{2} ; \quad S_\nu(k_z) \equiv \sin^2 \frac{ak_z(\nu)}{2} .$$

Na ovaj način, izraz za moguće energije fonona po formi je isti kao izraz (2.19) dobijen za idealne neograničene strukture, s tom razlikom što je tamo  $k_z$  praktično kontinualno promenljivo (u intervalu  $[0, \pi/a]$ ) kao što su  $k_x$  i  $k_y$ , a ovde je izrazito diskretno:

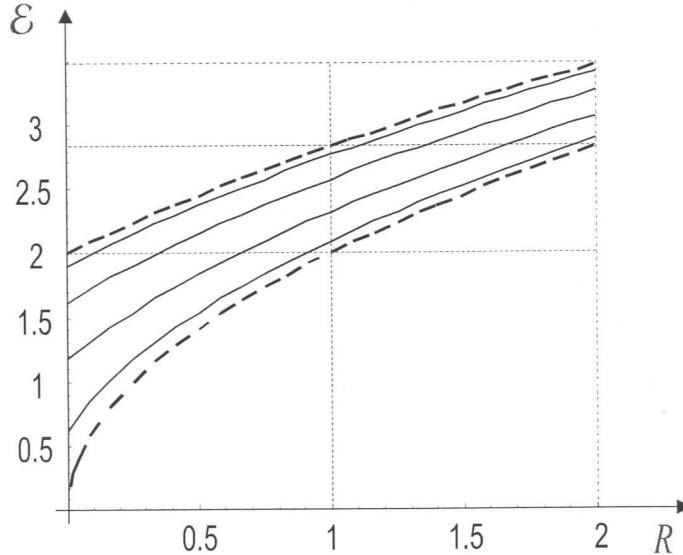
$$k_z(\nu) = \frac{\pi}{a} \frac{\nu}{N_z + 2} ; \quad \nu = 1, 2, 3, \dots, N_z + 1 . \quad (3.17)$$

Pored toga, uočava se da je:  $k_x^{min} = k_y^{min} = 0$ ;  $k_z^{min} \equiv k_z(\nu = 1) = \frac{\pi}{a} \frac{1}{N_z + 2} > 0$ , pošto je u pitanju tanak film, odnosno  $N_z \ll (N_x, N_y)$ , i:  $k_x^{max} = k_y^{max} = \frac{\pi}{a}$ ;  $k_z^{max} \equiv k_z(\nu = N_z + 1) = \frac{\pi}{a} \frac{N_z + 1}{N_z + 2} < \frac{\pi}{a}$ . Između minimalne i maksimalne vrednosti za  $k_z$ , pa prema tome i za  $\mathcal{E}_\nu(\vec{k})$ , postoji još  $N_z - 1$  diskretnih vrednosti<sup>5</sup>. To znači da fononi u tankim filmovima poseduju „donji“ energetski gep:

$$\Delta \equiv \Delta_{min} = \mathcal{E}_1^\alpha(k_x = k_y = 0, k_z = k_z^{min}) = 2 \sin \left[ \frac{\pi}{2(N_z + 2)} \right] , \quad (3.18)$$

kao i „gornji“, ali fizički manje interesantan gep.

Na osnovu ovih rezultata zakon disperzije (3.16) grafički je prikazan na slici 3.2 i to: za idealne beskonačne strukture (2.19) - isprekidanim linijama, između kojih je on kontinualan, i za tanki film (3.16) - punim linijama, on je diskretan.



Slika 3.2: Fononski spektar  $E = \mathcal{E}_\nu(R)$  i parametrom  $S(\nu)$

Primetni su gepovi i energetska diskretnost (za film), koji su isključiva posledica postojanja prostornih granica.

<sup>5</sup>Ukupan broj mogućih vrednosti kvaziimpulsa  $k_z$  jednak je broju energetskih i dvodimenzionalih podzona:  $N_z + 1$ .

### 3.3 Gustina fononskih stanja

U cilju određivanja gustine fononskih stanja tankog kristalnog filma primenićemo isti rezon koji je sproveden prilikom termodynamičke analize neograničenih sistema (odeljak 2.4). U tu svrhu moramo najpre redefinisati Debajevu frekvenciju ( $\omega_D^f$ ) i njoj korespondirajući talasni vektor ( $k_D^f$ ) za slučaj opisanog modela filma.

Translaciona simetrija filma narušena je duž  $z$ -pravca, te je:

$$\begin{aligned} k_{x/y} \in \left[ -\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a} \right] &\Rightarrow \Delta k_x = \Delta k_y = \frac{2\pi}{a}, \\ k_z \in \left[ \frac{1}{N_z+2} \cdot \frac{\pi}{a}, \frac{N_z+1}{N_z+2} \cdot \frac{\pi}{a} \right] &\Rightarrow \Delta k_z = \frac{N_z}{N_z+2} \cdot \frac{\pi}{a}. \end{aligned}$$

Sada je:

$$V = \left\{ \frac{\frac{4}{3}\pi(ak_D^f)^3}{a^3\Delta k_x\Delta k_y\Delta k_z} \right\} \Rightarrow k_D^f = \frac{\sqrt[3]{3\pi^2}}{a} \cdot \sqrt[3]{\frac{N_z}{N_z+2}}$$

i konačno:

$$k_D^f = k_D^b \cdot \sqrt[3]{\frac{N_z}{2(N_z+2)}}, \quad (3.19)$$

gde je  $k_D^b$  definisano relacijom (2.24). Odavde sledi da je:

$$\frac{k_D^f}{k_D^b} = \sqrt[3]{\frac{N_z}{2(N_z+2)}} < 1, \quad \text{odnosno:} \quad k_D^f < k_D^b.$$

Gustina fononskih stanja u filmu iznosi:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_D^f(\omega) &= \frac{3N_x N_y N_z^f a^3}{(2\pi)^3} \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{k_D^f} k^2 dk \delta(\omega - vk) = \frac{3N_x N_y N_z^f a^3}{2\pi^2} \cdot \frac{\omega^2}{v^3} \Rightarrow \\ &\Rightarrow \mathcal{D}_D^f(\omega) = \frac{N_x N_y N_z^f a^3}{2\pi^2} \cdot \frac{\omega^2}{v^3}, \end{aligned} \quad (3.20)$$

a Debajeva frekvencija se određuje iz uslova normiranja:

$$\begin{aligned} \int_0^{\omega_D^f} \mathcal{D}_D^f(\omega) d\omega &= N \Rightarrow \frac{N_x N_y N_z^f a^3}{2\pi^2 v^3} \int_0^{\omega_D^f} \omega^2 d\omega = N_x N_y \left( N_z^f + 1 \right) \Rightarrow \\ &\Rightarrow \omega_D^f = \frac{\sqrt[3]{6\pi^2}}{a} v \cdot \sqrt[3]{\frac{N_z^f + 1}{N_z^f}} = k_D^b v \cdot \sqrt[3]{\frac{N_z^f + 1}{N_z^f}} = \omega_D^b \cdot \sqrt[3]{\frac{N_z^f + 1}{N_z^f}}, \end{aligned} \quad (3.21)$$

na osnovu čega proizilazi:

$$\frac{\omega_D^f}{\omega_D^b} = \sqrt[3]{\frac{N_z^f + 1}{N_z^f}} > 1, \quad (3.22)$$

odnosno:  $\omega_D^f > \omega_D^b$ . Dakle, Debajeva frekvencija u tankom kristalnom filmu ima nešto višu vrednost u odnosu na neograničenu kristalnu strukturu. Na primer, za  $N_z^f = 3$  je  $\omega_D^f = 1,1 \cdot \omega_D^b$ , dok se u limesu  $N_z^f \rightarrow \infty$  dobija da  $\omega_D^f \rightarrow \omega_D^b$ , što je i očekivan rezultat.

Traženjem odnosa gustine fononskih stanja u idealnoj i film-strukturi, i to upravo na Debajevim frekvencijama:

$$\frac{\mathcal{D}_D^f(\omega_D^f)}{\mathcal{D}_D^b(\omega_D^b)} = \frac{N_z^f}{N_z^b} \cdot \left( \frac{\omega_D^f}{\omega_D^b} \right)^2 = \frac{N_z^f}{N_z^b} \cdot \left( \frac{N_z^f + 1}{N_z^f} \right)^{\frac{2}{3}}, \quad (3.23)$$

dobija se da je populacija fonona u filmu mnogo manja nego u odgovarajućoj idealnoj strukturi, tj.

$$\mathcal{D}_D^f(\omega_D^f) \ll \mathcal{D}_D^b(\omega_D^b), \quad (3.24)$$

jer je  $N_z^b \sim 10^8$ , a  $N_z^f \sim 10$ . Naravno, ovo važi uz pretpostavku da je brzina zvuka u obe sredine ista, tj. da je  $v_b \approx v_f$ .

Kako su fononi sa Debajevim frekvencijama odgovorni za električno i topotno transportna svojstva materijala, iz izraza (3.23) i (3.24) sledi da će film struktura biti slabiji električni i topotni provodnik od odgovarajućih masivnih struktura, ukoliko među njima nema hemijskih, odnosno strukturnih razlika.

### 3.4 Termodinamika filma

Unutrašnja energija tankog kristalnog filma izračunava se pomoću jednačine:

$$U_f = \int d\omega_f \mathcal{D}(\omega_f) \langle n(\omega_f, T) \rangle \hbar \omega_f = \int_0^{\omega_D^f} d\omega_f \frac{(\omega_f)^2 V}{2\pi^2 v^3} \left( \frac{\hbar \omega_f}{e^{\frac{\hbar \omega_f}{k_B T}} - 1} \right),$$

iz koje se – na isti način kao što je to učinjeno za neograničene kristalne strukture – dobija da je:

$$U_f = 9N_f k_B T \left( \frac{T}{T_D^f} \right)^3 \int_0^{x_D^f} \frac{(x_f)^3}{e^{x_f} - 1} dx_f, \quad (3.25)$$

gde je:  $N_f = N_x N_y (N_z + 1)$ ,  $x_f = \frac{\hbar \omega_f}{k_B T}$ ,  $x_b^f = \frac{T_D^f}{T}$  i  $T_D^f = \frac{\hbar \omega_D^f}{k_B}$ .

U granicama niskih temperatura, kada  $x_D^f \rightarrow \infty$ , sledi:

$$\int_0^{\infty} \frac{(x_f)^3}{e^{x_f} - 1} dx_f = \frac{\pi^4}{15},$$

pa je:

$$U_f = \frac{3\pi^4}{5} N_f k_B T \left( \frac{T}{T_D^f} \right)^3,$$

te se za topotnu kapacitivnost tankog kristalnog filma dobija izraz:

$$C_f = \frac{12\pi^4}{5} N_f k_B \left( \frac{T}{T_D^f} \right)^3. \quad (3.26)$$

Topotna kapacitivnost obračunata po jednoj elementarnoj celiji kristala iznosi:

$$C_f^* = \frac{1}{N_f} \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{12\pi^4}{5} k_B \left( \frac{T}{T_D^f} \right)^3 \equiv C_0 \cdot T_f^3, \quad (3.27)$$

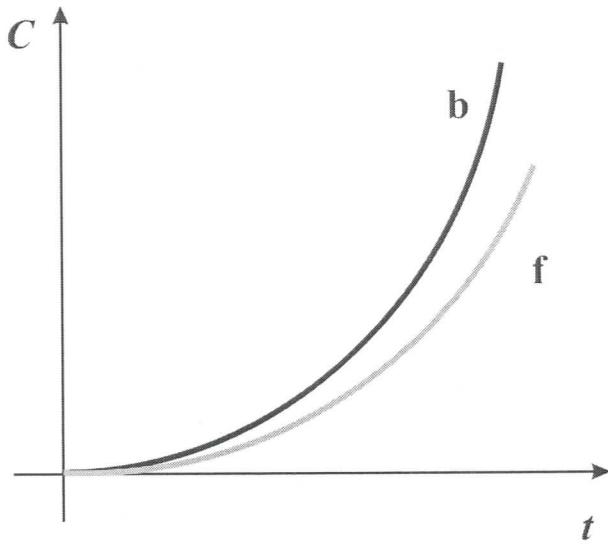
$$\text{gde je: } C_0 = \frac{12\pi^4}{5} k_B, \text{ a } T_f = \frac{T}{T_D^f}.$$

Upoređivanjem ovih vrednosti za neograničenu i film-strukturu, dobija se da je:

$$\frac{C_f^*}{C_b^*} = \left( \frac{T_f}{T_b} \right)^3 = \left( \frac{T_D^b}{T_D^f} \right)^3 = \left( \frac{\omega_D^b}{\omega_D^f} \right)^3,$$

što na osnovu (3.22) iznosi:

$$\frac{C_f^*}{C_b^*} = \frac{N_z^f}{N_z^f + 1}. \quad (3.28)$$



Slika 3.3: Toplotna kapacitivnost balka i filma

Dakle, u području niskih temperatura toplotna kapacitivnost filma poseduje nešto nižu vrednost u odnosu na onu kod masivnih uzoraka.

## 4 Z a k l j u č a k

U radu su istraženi i analizirani energetski spektri (moguća energetska stanja) fonona u kristalnim idealnim beskonačnim, tj. neograničenim i u jako ograničenim strukturama (ultratankim filmovima), sa primitivnom kubnom rešetkom. Na osnovu ovoga se došlo do sledećih važnijih rezultata.

1. Ove analize su pokazale bitne razlike u zakonu disperzije fonona u pomenutim sistemima, kao isključive posledice postojanja granica odgovarajuće strukture, u kojima energetski spektri poseduju energetske gepove. Veličine gepova zavise od dimenzija uzoraka (debljine filma) i veoma brzo - praktično parabolički, opadaju sa njihovim povećanjem.
2. Postojanje graničnih uslova ima za posledicu promenu energetske zone fonona. U odnosu na zonu dozvoljenih energija idealnih struktura sa praktično kontinualnim rasporedom, zona fononskih dozvoljenih energija u filmu je izrazito diskretna. Ona se sastoji od dvodimenzionalnih podzona. U svakoj od podzona energija uzima kontinualne vrednosti. Povećanjem broja slojeva filma povećava se broj diskretnih stanja unutar zone dozvoljenih energija.
3. Spektri fonona u film-strukturama poseduju donji (kao i jedan gornji) energetski gep. Posledica postojanja donjeg energetskog gepa može da se tumači na sledeći način: on odgovara energiji osnovnog stanja fononskog sistema i predstavlja najmanju energiju koju treba uložiti da bi se u filmu pojavili akustički fononi (optičkog tipa). Sve do te energije (aktivacione temperature) fononi se mogu nalaziti samo u nekim od vezanih stanja, npr. sa elektronima u Kuperovim parovima. Do te temperature ceo sistem se ponaša kao zamrznut.
4. Gustina fononskih stanja se drastično smanjuje pri redukciji dimenzija strukture, tj. ima mnogo manju vrednost u filmovima nego u neograničenim strukturama. To znači da se u ograničenim strukturama fononska pobuđenja slabije (sa manjim intenzitetom) javljaju. Debajev frekvencije imaju nešto više vrednosti u ultratankim filmovima, što znači da je fononska zona izdignuta ka višim frekvencijama.
5. Sve razlike između posmatranih (neograničenih i ograničenih) kristalnih sistema su izraženije, što je film tanji i iščezavaju kada debljina filma teži beskonačnosti.
6. Na relativno niskim temperaturama topotna kapacitivnost ima niže vrednosti u tankim filmovima nego u masivnim uzorcima, što je u skladu sa činjenicom da je energija pobuđivanja fonona u filmu veća od one u balku.

Kako su fononi sa Debajevim frekvencijama odgovorni za električno i topotno transportna svojstva materijala, iz ove analize sledi da će film-struktura biti slabiji električni i topotni provodnik od odgovarajućih masivnih struktura, ukoliko među njima nema hemijskih, odnosno strukturnih razlika.

## 5 Literatura

1. D.Raković:  
FIZIČKE OSNOVE I KARAKTERISTIKE ELEKTROTEHNIČKIH MATERIJALA,  
*Elektrotehnički fakultet*, Beograd 1995.
2. Z.Ikonić i V.Milanović:  
POLUPROVODNIČKE KVANTNE MIKROSTRUKTURE,  
*Univerzitet u Beogradu*, Beograd 1997.
3. S.G.Davison and M.Steslicka:  
BASIC THEORY OF SURFACE STATES,  
*Clarendon*, Oxford 1996.
4. M.G.Cottam, D.R.Tilley:  
INTRODUCTION TO SURFACE AND SUPERLATTICE EXCITATIONS,  
*Univ. Press*, Cambridge 1989.
5. Ž.A.Spašojević i Z.V.Popović:  
ELEKTROTEHNIČKI I ELEKTRONSKI MATERIJALI,  
*Promezia*, Beograd 1995.
6. I.Supek:  
TEORIJSKA FIZIKA I STRUKTURA MATERIJE,  
*Školska knjiga*, Zagreb 1977.
7. C.Kittel:  
QUANTUM THEORY OF SOLIDS,  
*Wiley*, New York 1963.
8. B.S.Tošić:  
STATISTIČKA FIZIKA,  
*Institut za fiziku PMF*, Novi Sad 1978.
9. G.Rickayzen:  
GREEN'S FUNCTIONS AND CONDENSED MATTER,  
*Academic Press*, London 1980.
10. S.Jaćimovski:  
KOLEKTIVNO MEHANIČKO OSCILOVANJE I TERMODINAMIČKE  
OSOBINE SUPERPROVODNIH FILMOVA,  
*Elektrotehnički fakultet*, Beograd 1997.
11. L.A.Gribov:  
THEORY OF INFRARED SPECTRA OF POLYMERS  
*Nauka*, Moskva 1977.
12. D.S.Mitrinović, D.Mihailović i P.M.Vasić:  
LINEARNA ALGEBRA, POLINOMI, ANALITIČKA GEOMETRIJA  
*Gradjevinska knjiga*, Beograd 1990.

**UNIVERZITET U NOVOM SADU**  
**PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET**  
**KLJUČNA DOKUMENTACIJSKA INFORMACIJA**

- Redni broj:  
RBR
- Identifikacioni broj:  
IBR
- Tip dokumentacije:  
*Monografska dokumentacija*  
TD
- Tip zapisa:  
*Tekstualni štampani materijal*  
TZ
- Vrsta rada:  
*Diplomski rad*  
VR
- Autor:  
*Velizar Monić, br.dos. 341/98*  
AU
- Mentor:  
*Akademik dr Jovan Šetrajčić,  
redovni profesor, PMF, Novi Sad*  
MN
- Naslov rada:  
*Fononski ideo u  
termodynamici nanofilmova*  
NR
- Jezik publikacije:  
*Srpski (latinica)*  
JP
- Jezik izvoda:  
*Srpski*  
JI
- Zemlja publikovanja:  
*Srbija*  
ZP
- Uže geografsko područje:  
*Vojvodina*  
UGP
- Godina:  
2007.
- Izdavač:  
*Autorski reprint*  
IZ
- Mesto i adresa:  
*Prirodno-matematički fakultet,  
Trg Dositeja Obradovića 4, 21000 Novi Sad*  
MA
- Fizički opis rada:  
(5/25/12/0/5/3/0)  
FO
- Naučna oblast:  
*Fizika*  
NO
- Naučna disciplina:  
*Fizika čvrstog stanja*  
ND
- Predmetna određnica / ključne reči:  
*ultratanki filmovi, fononi,  
Grinove funkcije, spektri, termodynamika*  
PO
- Čuva se:  
*Biblioteka Instituta za fiziku,  
PMF Novi Sad*
- Izvod:  
*U radu je primjenjen metod dvovremenskih  
Grinovih funkcija za određivanje energetskih  
spektara i gustine stanja fonona u ultratankim  
krstalnim filmovima. Izračunata je toplotna  
kapacitivnost sistema.*  
IZ
- Datum prihvatanja teme od strane Veća:  
.05.2007.
- Datum odbrane:  
.07.2007.
- Datum odbrane:  
DO
- Članovi komisije:
  - Predsednik:  
*Dr Milica Pavkov-Hrvojević,  
vanred. profesor PMF, Novi Sad*
  - Članovi:  
*Akademik dr Jovan Šetrajčić,  
red. profesor PMF, Novi Sad*  
*Dr Dušan Lazar,  
docent PMF, Novi Sad*
- KO

**UNIVERSITY OF NOVI SAD**  
**FACULTY OF SCIENCES**  
**KEY WORDS DOCUMENTATION**

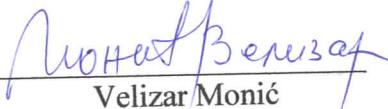
- Accession number:  
ANO
- Identification number:  
INO
- Document type:  
*Monograph type*  
DT
- Type of record:  
*Printed text*  
TR
- Contents Code:  
*Diploma work*  
CC
- Author:  
*Velizar Monić*  
AU
- Mentor:  
*Academician, Prof. Dr. Jovan Šetrajčić*  
MN
- Title:  
*Phonon Contribution in  
Thermodynamics of Nanofilms*  
NR
- Language of text:  
*Serbian*  
LT
- Language of abstract:  
*English*  
LA
- Country of publication:  
*Serbia*  
CP
- Locality of publication:  
*Vojvodina*  
LP
- Publication year:  
2007.  
PY
- Publisher:  
*Author's reprint*  
PU
- Publ.place:  
*Novi Sad,  
Department of Physics,  
Faculty of Sciences,  
Trg Dositeja Obradovića 4*  
PP
- Physical description:  
*(5/25/12/0/5/3/0)*  
PD
- Scientific field:  
*Physics*  
SF
- Scientific discipline:  
*Solid State Physics*  
SD
- Key words:  
*ultrathin films, phonons,  
Green's functions, spectra, thermodynamics*  
KW
- Holding data:  
*Library  
Department of Physics, Novi Sad*
- HD Note: N
- Abstract:  
*In this work, the method of two-time dependent Green's functions was applied to researching of the energy spectra and state densities of phonons in ultrathin crystalline films. Heat capacity of systems was calculated.*  
AB
- Accepted by the Scientific Board on:  
01.2007.  
ASB
- Defended:  
.04.2007.  
DE
- Work defend board:
  - DB President:  
*Dr. Milica Pavkov-Hrvojević,  
Associated Professor, Faculty of Sciences,  
University of Novi Sad*
  - Members:  
*Academician Dr. Jovan Šetrajčić,  
Full Professor, Faculty of Sciences,  
University of Novi Sad*
  - Dr. Dušan Lazar,  
Dozent, Faculty of Sciences,  
University of Novi Sad*

## Kratka biografija autora



Rodjen 18.08.1976. u Zrenjaninu. Završio osnovnu školu "Đura Jakšić" u Srpskoj Crnji, a zatim Građevinsko-elektrotehničku školu "Nikola Tesla", u Zrenjaninu. Prirodno-matematički fakultet – Institut za fiziku, smer diplomirani fizičar upisao 1998.

Novi Sad, 25.06.2007.

  
Velizar Monić

