UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET
INSTITUT ZA FIZIKU

Živomir B. Vasiljević

TERMODINAMIKA FONONA U FILMOVIMA

- DIPLOMSKI RAD -

NOVI SAD, septembar 1994.

Koristim priliku da se zahvalim svom mentoru dr J.P.Šetrajčiću na svesrdnoj pomoći prilikom izrade ovog rada.
Posebno se zahvaljujem našem "razrednom" dr D.Kaporu na brizi tokom studija, kao i prof. A. Utješanoviću na tehničkoj pomoći.

SADRŽAJ

Strana

1. UVOD 4

2. OSNOVE TERMODINAMIKE KRISTALA 6
   2.1 Stanja i spektri fonona u idealnom kristalu 6
   2.2 Termodinamika idealnog kristala 11

3. TERMODINAMIČKO PONAŠANJE FILM-STRUKTURA 17
   3.1 Stanja i spektri fonona u filmovima 17
   3.2 Termodinamika fononskih filmova 24

4. ZAKLJUČAK 31

5. LITERATURA 33

1. U V O D

Predmet ovog rada je istraživanje termodinamičkog ponašanja film struktura sa narušenom translacionom simetrijom, zbog prisustva graničnih površina tog sistema.

Sva tela u prirodi teže da se nadju u termodinamičkoj ravnoteži i da bi se izvela iz ravnoteže potrebno je da se termički pobude. Ta osnovna pobudjenja u kristalu se nazivaju fononima. Oni su uvek prisutni podsistem, bez obzira da li u sistemu postoje neka druga pobudjenja.

Pojam fonona se uvodi prilikom kvantnomehaničke analize LHO. Najmanji kvant pobudjenja linearnog oscilatora, čija energija iznosi $\hbar\,\omega$, naziva se - **fonon** . Energija fonona zavisi od mase oscilatora i konstante koja karakteriše elastičnu silu oscilatora. U kvantnoj teoriji čvrstog stanja fononi predstavljaju kvant oscilovanja celog kristala a ne pobudjenja pojedinačnih atoma. Atomi kristalne rešetke osciluju oko svojih ravnotežnih položaja pa se i kristal može tretirati kao sistem povezanih oscilatora. Usled te povezanosti atoma, jedan atom pri svom oscilovanju trpi uticaj svih ostalih atoma koji ga okružuju. Svaki kvant oscilovanja u kristalu ima obeležje svih atoma kristala i sila koje izmedju njih deluju.

Film - strukture predstavljaju beskonačne kristalne strukture koje su neograničene u XY - ravnima, a imaju konačnu debljinu u z - pravcu. Na današnjem stupnju razvoja tehnologije moguće je dobiti veoma tanke filmove, reda veličine nekoliko kristalnih medjuatomskih rastojanja.

Rad je posvećen analizi najvažnijih termodinamičkih veličina (unutrašnja energija, specifična toplota, slobodna energija i entropija) radi njihovog poredjenja sa istim veličinama za idealne beskonačne strukture sa ciljem da bi dobijeni rezultati i korišćeni metodi mogli kasnije poslužiti za analizu struktura u kojima je translaciona simetrija duž privilegovanog pravca narušena (dopingovanjem - dodavanjem primesa i slično).

U prvom delu ovog rada dat je prikaz termodinamičkog ponašanja masivne kristalne strukture uz korišćenje prvo klasičnih izraza za potencijalnu i kinetičku energiju a zatim prelaz sa istih na kvantnomehaničke veličine.

Uz korišćenje pogodnosti koju daje reprezentacija druge kvantizacije pokušalo se što bolje objasniti nastajanje akustičkih i optičkih grana oscilovanja putem disperzione jednačine. Zatim, preko matrice gustine su definisane i izračunate sve relevantne termodinamičke veličine kao i njihovo ponašanje u uslovima visokih, niskih i srednjih temperatura.

Drugi deo rada predstavlja prikaz termodinamičkog ponašanja film - struktura. Najpre će biti prikazano kako se korišćenjem hamiltonijana fononskog podsistema idealnog filma u aproksimaciji najbližih suseda dolazi do prostog sistema homogenih diferencijalnih jednačina (čija su rešenja data preko jednog od oblika Čebiševljevih polinoma druge vrste). Rešavanjem tog sistema se dolazi do zakona disperzije fonona u tankom nedeformisanom filmu. Najvažniji deo rada je sadržan u drugom delu i odnosi se na utvrdjivanje zakonitosti termodinamike fonoskih film - struktura. Korišćenjem zakona disperzije fonona, kao i standardnih izraza za unutrašnju energiju, specifičnu toplotu, slobodnu energiju i entropiju, predstavljena je pogodnim matematičkim aparatom slika termodinamičkih zbivanja film - struktura.

Završni deo rada predstavlja zaključke svega onoga što je u okviru ovog rada postignuto, tj, predstavlja rezime osnovnih rezultata koji su dobijeni na osnovu postavljenog modela.

2. OSCILOVANJE ATOMA KRISTALNE REŠETKE

Ako se želi nešto reći o termodinamici kristala najpre treba nešto reći o kristalima kao masivnim strukturama koji su jedan od oblika kondenzovanog stanja materije.

Kristali su uredjeni sistemi kojih u prirodi ima veoma veliki broj ali koji su daleko od idealnih zbog toga što se prilikom izgradnje kristala javljaju vakancije, dislokacije i ostali defekti. Iz tih razloga je otežano praćenje ponašanja raznih termodinamičkih veličina kod ovakvih struktura. Zato se prilikom izučavanja istih pribegava raznim aproksimacijama u cilju postizanja što boljih uslova koji se mogu tretirati kao uslovi karakteristični za idealne masivne strukture.

U prvim pokušajima definisanja termodinamičkih veličina korišćene su metode klasične fizike a zbog jednostavnosti polazilo se od jednodimenzionih struktura a rezultati su uopštavani za trodimenzione strukture. Medjutim, upotrebom kvantnomehaničke analize došlo se do veoma egzaktnih izraza koji u potpunosti opisuju termodinamiku navedenih sistema.

2.1 Stanja i spektri fonona u idealnom kristalu

Jednostavnosti radi razmatraju se prvo jednoatomni kristali. Neka su m - masa atoma i $\vec{r}_{\vec{n},\alpha}(\alpha = 1,2,3)$ tri vektorske komponente pomeranja atoma iz čvora rešetke, odredjene vektorom rešetke $\vec{n}$. Tada se kinetička energija K pomeranja atoma iz ravnotežnog položaja izražava preko brzine tog pomeranja $\dot{\vec{r}}_{\vec{n},\alpha}$ formulom:

$$K = \frac{1}{2}\, m \sum_{\vec{n},\alpha} \dot{\vec{r}}_{\vec{n},\alpha}^{\,2} \;; \qquad \alpha = 1,2,3\,. \tag{2.1}$$

U trodimenzionom kristalu broj suseda oko svakog atoma raste proporcionalno kvadratu rastojanja. Zato se ne može ograničiti samo na uzimanje u obzir uzajamnog dejstva izmedju najbližih suseda. U skladu sa tim, potencijalna energija harmonijskog oscilovanja data je u obliku:

$$U = \frac{1}{2} \sum_{\vec{n},\vec{m},\alpha\beta} V_{\alpha\beta}(\vec{n} - \vec{m})\, \vec{r}_{\vec{n},\alpha}\, \vec{r}_{\vec{m},\beta} \ , \tag{2.2}$$

gde komponente tenzora drugog reda $V_{\alpha\beta}(\vec{n} - \vec{m})$ zadovoljavaju uslove:

$$V_{\alpha\beta}(\vec{n} - \vec{m}) = V_{\beta\alpha}(\vec{m} - \vec{n}) \ ; \quad \sum_{\vec{n}} V_{\alpha\beta}(\vec{n} - \vec{m}) = 0 \ . \tag{2.3}$$

Jednakost (2.3) sledi iz toga da je ukupna sila jednaka nuli, aktivnija na posmatranom atomu od svih ostalih, ako je ona uslovljena prenosom celokupnog kristala kao celine. U tom delu je:

$$\vec{F}_{\vec{m},\beta} = -\frac{\partial U}{\partial \vec{r}_{\vec{m},\beta}} = -\sum_{\vec{n},\alpha} V_{\alpha\beta}(\vec{n} - \vec{m})\, \vec{r}_{\vec{n},\alpha} \ . \tag{2.4}$$

Uzimajući ciklične granične uslove, može se pretpostaviti da u osnovnoj oblasti kristala ima N elementarnih ćelija.

Uvodjenjem u izraze (2.1) i (2.2) kanonske transformacije preko kolektivnih promenljivih ($A_{\vec{k}} = A^*_{-\vec{k}}$) dobija se:

$$\vec{r}_{\vec{n},\alpha} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} \vec{e}_\alpha(\vec{k})\, A_{\vec{k}}\, e^{i\,\vec{k}\,\vec{n}} \ ; \quad \alpha = 1,2,3 \ , \tag{2.5}$$

gde su $\vec{e}_\alpha(\vec{k}) = \vec{e}_\alpha(-\vec{k})$ - ortovi vektora polarizacije fonona.

Unitarnost transformacije (2.5) obezbedjuju jednačine:

$$\frac{1}{N} \sum_{\vec{n}} e^{i(\vec{k}-\vec{k}^{\,\prime})\vec{n}} = \delta_{\vec{k},\vec{k}^{\,\prime}} \ ; \quad \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} e^{i(\vec{n}-\vec{n}^{\,\prime})\vec{k}} = \delta_{\vec{n},\vec{n}^{\,\prime}} \ , \tag{2.6}$$

gde se sumiranje vrši po svim N - vektorima rešetke ($\vec{n}$), tj. po svim N - talasnim vektorima ($\vec{k}$) iz prve Briluenove zone. Posle niza transformacija dobija se:

$$K = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k},\alpha} \vec{e}_\alpha(\vec{k})\, \vec{e}_\alpha(-\vec{k})\, \dot{A}_{\vec{k}}\, \dot{A}_{-\vec{k}} \ , \tag{2.7}$$

$$U = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k},\alpha\beta} D_{\alpha\beta}(\vec{k}) \vec{e}_\alpha(\vec{k}) \, \vec{e}_\beta(\vec{k}) \, A_{\vec{k}} \, A_{-\vec{k}} \, , \tag{2.8}$$

gde su $D_{\alpha\beta}(\vec{k}) = D^*_{\beta\alpha}(\vec{k}) = D^*_{\alpha\beta}(-\vec{k}) = (1/m) \sum_{\vec{n}} V_{\alpha\beta}(\vec{n}) \, e^{i\,\vec{k}\,\vec{n}}$ matrični elementi matrice sile.

Uvodjenjem Langranževe funkcije $L = K - U$ Langranževa jednačina dobija oblik:

$$\vec{e}_\alpha(\vec{k}) \, \ddot{A}_{\vec{k}} + \sum_{\beta} D_{\alpha\beta}(\vec{k}) \, \vec{e}_\beta(\vec{k}) \, A_{\vec{k}} = 0 \, . \tag{2.9}$$

Pomoću smene $\ddot{A}_{\vec{k}} = - \, \Omega^2(\vec{k}) \, \vec{A}_k$ diferencijalne jednačine se transformišu u algebarski sistem relativno poznatih jednačina $\vec{e}_\alpha(\vec{k})$:

$$\Omega^2(\vec{k}) \, \vec{e}_\alpha(\vec{k}) - \sum_{\beta} D_{\alpha\beta}(\vec{k}) \, \vec{e}_\beta(\vec{k}) = 0 \, . \tag{2.10}$$

Iz uslova netrivijalnosti rešenja tih jednačina nalazi se disperziona jednačina:

$$\| \; \Omega^2(\vec{k}) \, \delta_{\alpha\beta} - D_{\alpha\beta}(\vec{k}) \; \| = 0 \, , \tag{2.11}$$

gde su frekvencije $\Omega^2(\vec{k})$ odredjene za svaku vrednost $\vec{k}$.

Jednačina (2.10) ima tri korena $\Omega^2_s(\vec{k})$, $(s = 1,2,3)$. Odgovarajuća tri rešenja odredjuju tri vektora $\vec{e}^{\,s}(\vec{k})$ sa komponentama $e^{(s)}(\vec{k})$. Ti vektori su uzajamno ortogonalni i ako se odredjuju jednačinom (2.11) sa tačnošću do konstante, može se dobiti:

$$\sum_{\alpha} \vec{e}^{\,(s)}_\alpha(\vec{k}) \;\; \vec{e}^{\,(s')}_\alpha(\vec{k}) \; = \; \delta_{s\,s'} \, . \tag{2.12}$$

Kad $\vec{k} \longrightarrow 0$, matrični elementi $D_{\alpha\beta}(\vec{k})$, saglasno sa (2.3), teže nuli. Zato sve tri granične frekvencije $\Omega_s(\vec{k})$ takodje teže nuli kad $\vec{k} \longrightarrow 0$. Ta rešenja predstavljaju tri grane akustičkih oscilacija.

Kod kristala kubne singonije jedan od vektora $\vec{e}^{\,(s)}(\vec{k})$ je usmeren duž vektora $\vec{k}$. Odgovarajuće oscilacije se nazivaju uzdužnim. Druga dva vektora su ortogonalni na prethodni ali su suprotnog smera, jedan u odnosu na drugi. Oni odredjuju grane poprečnih oscilacija. U izotropnim kristalima tri rešenja $e^s(\vec{k})$ su uzajamno ortogonalna, ali samo za neki od odvojenih pravaca u kristalu, jedan od njih se poklapa sa $\vec{k}$.

U skladu sa ta tri rešenja sistema jednačina (2.10) komponente pomeraja atoma u kristalu (2.5) biće odredjene trima kolektivnim promenljivim $A_{\vec{k},s}$ za svako $\vec{k}$, pomoću izraza:

$$\vec{r}_{\vec{n},\alpha} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k},s} \vec{e}^{\,s}_{\alpha}(\vec{k})\, A_{\vec{k},s}\, e^{i\,\vec{k}\,\vec{n}} \quad ; \quad s = 1,2,3\,. \tag{2.13}$$

Pri tome, kod korišćenja izraza (2.7) i (2.8) izrazi za kinetičku i potencijalnu energiju se transformišu u izraze:

$$K = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k},s} \dot{A}_{\vec{k},s}\, \dot{A}_{-\vec{k},s} \quad ; \quad \dot{A}_{\vec{k},s} = -\,i\,\Omega_s(\vec{k})\, A_{\vec{k},s}\,, \tag{2.14}$$

$$U = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k},s} \Omega^2_s(\vec{k})\, A_{\vec{k},s}\, A_{-\vec{k},s}\,, \tag{2.15}$$

a generalisani impulsi $P_{\vec{k},s}$ preko generalisanih koordinata $A_{\vec{k},s}$ odgovarajućom jednačinom:

$$P_{\vec{k},s} = \frac{\partial L}{\partial \dot{A}_{\vec{k},s}} = \frac{\partial (K-U)}{\partial \dot{A}_{\vec{k},s}} = \dot{A}_{-\vec{k},s}\,. \tag{2.16}$$

Prelaskom na kvantnomehanički Hamiltonov operator ostvaruje se smena generalisanih koordinata i impulsa operatorima:

$$A_{\vec{k},s} \to \hat{A}_{\vec{k},s} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\,\Omega_s(\vec{k})}}\,\left(\hat{b}_{\vec{k},s} + \hat{b}^{+}_{-\vec{k},s}\right)\,, \tag{2.17}$$

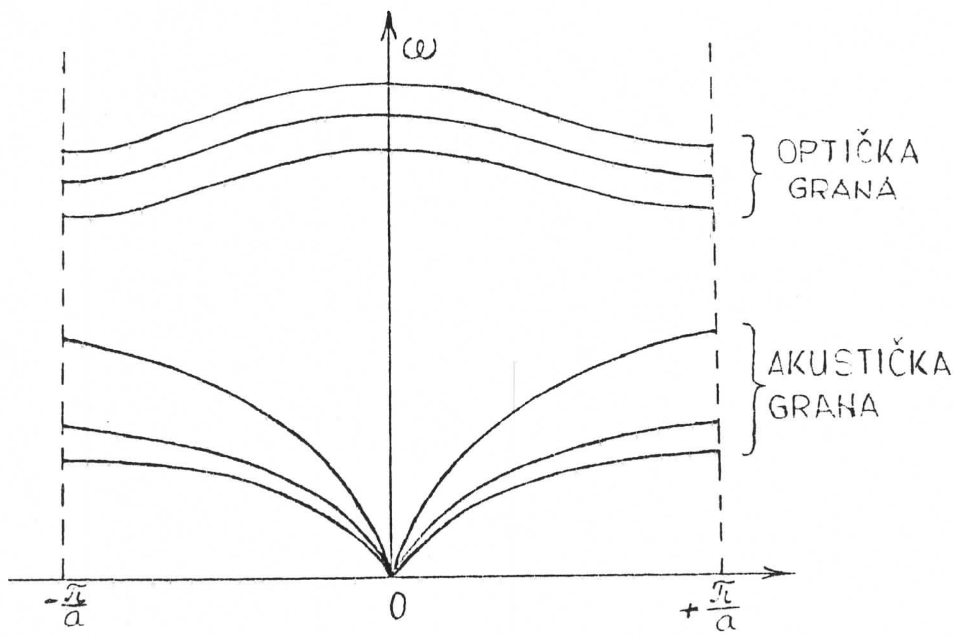
$$P_{\vec{k},s} \to \hat{P}_{\vec{k},s} = i\,\sqrt{\frac{\hbar\,\Omega_s(\vec{k})}{2}}\,\left(\hat{b}^{+}_{\vec{k},s} - \hat{b}_{\vec{k},s}\right)\,, \tag{2.18}$$

gde su operatori kreacije $\hat{b}^{+}_{\vec{k},s}$ i anihilacije $\hat{b}_{\vec{k},s}$ fonona u stanjima $\mid \nu_{\vec{k},s} >$, karakterističan broj fonona svake grane oscilovanja. Oni zadovoljavaju uobičajene komutacione relacije za Boze - operatore.

Zamenom izraza (2.17) i (2.18) u (2.13) dobija se izraz za vektore pomeraja atoma iz ravnotežnih položaja:

$$\hat{r}_{\vec{n},\alpha} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\,N}} \sum_{\vec{k},s} \frac{\vec{e}^{\,(s)}_{\alpha}}{\sqrt{m_\alpha\,\Omega_s(\vec{k})}}\,\left(\hat{b}_{\vec{k},s} + \hat{b}^{+}_{-\vec{k},s}\right)\, e^{i\,\vec{k}\,\vec{n}}\,. \tag{2.19}$$

Na taj način mogu se naći operatori i drugih fizičkih veličina, ako se oni izraze preko generalisanih impulsa $P_{\vec{k},s}$ i generalisanih koordinata $A_{\vec{k},s}$. Dobijeni rezultati se mogu generalizovati i za slučaj sa σ - atoma u elementarnoj ćeliji. Fononski spektar takvih kristala se sastoji iz 3σ grana sa frekvencijama $\Omega_s(\vec{k})$ za $s = 1, 2, \ldots, 3\,\sigma$.



Slika 2.1

Frekvencije sve tri grane teži nuli kada $\vec{k} \to 0$. One se nazivaju **akustičkim granama** . Ostale $3\,\sigma - 3$ grane oscilovanja nazivaju se **optičkim granama** .

Oscilovanje atoma u kristalima ogleda se u nizu pojava, pri apsorpciji i emitovanju infracrvene svetlosti, pri neelastičnom rasejanju vidljive svetlosti, pri neelastičnom rasejanju neutrona, pri istraživanju rezonantne apsorpcije γ - kvanata jezgara atoma (Mesbauerov efekat) i drugim. U raznim pojavama se javljaju razne grane oscilovanja. Na primer, apsorpcija i emisija zraka povezana sa stvara-njem i uništavanjem fonona koji odgovaraju poprečnim oscilacijama, menjaju električni dipolni moment kristala. Ramanov efekat je vezan za fonone odgovarajućih poprečnih oscilacija atoma (promena polarizacije kristala) rasejanje neutrona je vezano sa uzdužnim fononima koji izazivaju lokalnu promenu gustine kristala.

2.2 Termodinamika idealnog kristala

Pri toplotnom pobudjenju kristala u njemu nastaju fononi. Oni se prostiru kroz kristal brzinom zvuka i prenose toplotnu energiju. Toplotni tok J nastao u oblasti niskih temperatura T odredjen je izrazom:

$$\vec{J} = - \gamma \, grad \, T \, , \tag{2.20}$$

gde je γ - toplotna provodnost.

Ako uzamajno dejstvo medju fononima odsustvuje ili se ostvaruje bez procesa prebačaja, zakon održanja impulsa u svakom medjudejstvu je ispunjen. Stanje toplotne otpornosti ukazuje da u procesima uzajamnog dejstva fonona se narušava zakon održanja impulsa, tj. ostvaruje se proces prebačaja. Jedino su moguči procesi prebačaja samo pri uzajamnom dejstvu fonona sa energijom $\hbar \, \omega$, prekoračivši kritičnu energiju E_0. Kod niskih temperatura, srednji broj tih fonona proporcionalan je $exp\,(- E_0/k\,T)$ a toplotna provodljivost sa $exp\,(E_0/k\,T)$. Takva temperaturna zavisnost bila je narušena u Bermanovim ogledima za kristale dijamanta $E_0 \sim \Theta/2.6$ i čvstog helijuma $E_0 \sim \Theta/2.3$, gde je $\Theta = k\,T$.

U kristalu u kvantnom stanju $\mid k \;\, s >$ može se pobuditi ma koji broj ν_{ks} - fonona. Prema tome, fononi obrazuju "gas" kvazičestica koji se ponaša po Boze - Ajnštajnovoj statistici. Zbog uzajamnog dejstva izmedju fonona, uslo-vljenim anharmonijskim efektima, broj fonona u kristalu se ne održava i oni se preraspodeljuju po raznim stanjima, tako da nastupa toplotna ravnoteža kada se kristal nalazi na odredjenoj temperaturi. Za izračunavanje srednjih energija fonona pri termodinamičkoj ravnoteži koriste se zakoni statističke fizike. Stanje sistema u termodinamici se nalazi tako što se opisuje talasnom funkcijom, statističkim operatorom ili matricom gustine. Matrica gustine za sisteme, pri konstantnoj temperaturi i pritisku, odredjuje se izrazom:

$$\rho = exp\left(\frac{\Phi - H - \mu \, \hat{N}}{\Theta}\right) , \tag{2.21}$$

gde je $\hat{N}$ - operator broja čestica, H - Hamiltonov operator, μ - hemijski potencijal (odnosi se na jednu česticu), Φ - termodinamički potencijal promenljivih μ i Θ. Matrica gustine (2.21) opisuje sistem koji može razmenjivati energiju i čestice sa okolinom pri konstantnoj temperaturi i pritisku (tzv. veliki kanonski ansambl). Termodinamički potencijal odredjuje se iz uslova normiranja matrice gustine:

$$1 = Sp \cdot \rho = \sum_s < s \mid \rho \mid s > , \tag{2.22}$$

i jednakosti:

$$\Phi = - \Theta \, \ln \, Sp \left\{ e^{\frac{\mu \hat{N} - H}{\Theta}} \right\} . \tag{2.23}$$

U (2.22) sumiranje se izvodi pri potpunom zbiru stanja $| s >$ sistema i zavisi od energije i broja čestica u sistemu.

Hemijski potencijal sistema μ odredjuje se uslovom:

$$\mu = \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \hat{N}} \right)_{\theta, p} . \tag{2.24}$$

Pomoću matrice gustine (2.21) moguće je izračunati srednju vrednost ma koje fizičke veličine A, ako mu je operator $\hat{A}$.

$$\overline{A} = Sp\,(\rho\,\hat{A})\,.$$

Prema tome srednji broj čestica u sistemu se definiše kao:

$$\overline{N} = Sp\,(\rho\,\hat{N})\,. \tag{2.25}$$

Ako se broj čestica u sistemu održava, to uslov (2.25) odredjuje, u izmenjenom obliku, hemijski potencijal sistema. Ravnotežno stanje sistema se odredjuje uslovom minimuma termodinamičkog potencijala u odnosu na promenu broja čestica:

$$\mu = \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \hat{N}} \right)_{\Theta, p} = 0\,. \tag{2.26}$$

Na taj način u ravnotežnom stanju, sistem sa promenljivim brojem čestica (sistem fonona) ima hemijski potencijal jednak nuli. U tom slučaju slobodna energija sistema F se poklapa sa termodinamičkim potencijalom, tj. $F = \Phi + \mu\, N$ i za $\mu = 0$ sledi:

$$F = -\,\Theta\,\ln\,Sp\left\{ e^{-\frac{H}{\Theta}} \right\}. \tag{2.27}$$

Znajući izraz za slobodnu energiju (2.27) može se izračunati srednja vrednost energije sistema:

$$E = F - \Theta \frac{\partial F}{\partial \Theta} = -\,\Theta^2 \frac{\partial}{\partial \Theta}\left(\frac{F}{\Theta} \right). \tag{2.28}$$

Ako se stanja čestica u sistemu karakterišu kvantnim brojevima i operatorima H i $\hat{N}$ kao: $H = \sum_s H_s$; $N = \sum_s N_s$; $\Phi = \sum_s \Phi_s$, tada se termodinamički potencijal može napisati u obliku:

$$\Phi_s = -\,\Theta\,\ln\,Sp\left\{ e^{\frac{\mu N_s - H_s}{\Theta}} \right\}, \tag{2.29}$$

gde su H_s i N_s - sopstvene funkcije istih operatora; $H_s \mid \nu_s >= E_s \mid \nu_s >$; $N_s \mid \nu_s >= \nu_s \mid \nu_s >$.

Zamenom ove vrednosti u (2.29) dobija se termodinamički potencijal stanja:

$$\Phi_s = \Theta \ln \left(1 - e^{\frac{\mu - E_s}{\Theta}} \right) , \tag{2.30}$$

$$\overline{\nu_s} = - \frac{\partial \Phi_s}{\partial \mu} = \left(e^{\frac{E_s - \mu}{\theta}} - 1 \right)^{-1} . \tag{2.31}$$

Stanja fonona u kristalu se karakterišu talasnim vektorom $\vec{k}$ i granom oscilovanja. Ako se odbaci energija osnovnog stanja E_0, operatori energije i broja fonona će biti:

$$H = \sum_{\vec{k},\alpha} \hbar\, \Omega_\alpha(\vec{k})\, \hat{b}^+_{\vec{k},\alpha}\, \hat{b}_{\vec{k},\alpha} + \mathcal{H} \; ; \quad N = \sum_{\vec{k},\alpha} \hat{b}^+_{\vec{k},\alpha}\, \hat{b}_{\vec{k},\alpha} , \tag{2.32}$$

gde je $\mathcal{H}$ - operator anharmonijske popravke. Taj operator unosi mali doprinos energiji fonona i obezbedjuje uspostavljanje termodinamičke ravnoteže u sistemu i odgovoran je za neočuvanje broja fonona. Ovaj član se uzima u obzir samo toliko da pri $\mu = 0$ mogu da se primene formule statističke fizike za ravnotežna stanja.

Dakle, ako je $\mu = 0$ i korišćenjem izraza (2.28) i (2.32) dobijaju se sledeći izrazi za srednji broj fonona u stanju $| \nu_{\vec{k},\alpha} >$:

$$\overline{\nu_{\vec{k},\alpha}} = \left(e^{\frac{\hbar\, \Omega_\alpha(\vec{k})}{\Theta}} - 1 \right)^{-1} ; \tag{2.33}$$

i za slobodnu energiju kristala:

$$F \equiv \Phi = \sum_{\vec{k},\alpha} \Phi_{\vec{k},\alpha} = \Theta \sum_{\vec{k},\alpha} \ln \left\{ 1 - e^{-\frac{\hbar\, \omega_\alpha(\vec{k})}{\Theta}} \right\} . \tag{2.34}$$

Posebno jednostavno se izračunava slobodna energija izotropnih kristala u graničnim slučajevima - niskih i visokih temperatura.

Niske temperature

Ove temperature su takve da je prikladno pretpostaviti da akustičke grane sa energijom proporcionalnoj talasnom vektoru:

$$\hbar\, \Omega_\alpha(\vec{k}) = \hbar\, v_{\alpha,\vec{k}} \; ; \qquad za \quad a\, k_{max} \approx 0.1 , \tag{2.35}$$

gde je v_α - brzina zvuka odgovarajuće grane oscilovanja, reda veličine $v_\alpha \sim (10^5 \div 10^7)\ m/s$, ako je $a \approx 10^{-10}\ m$. Na taj način, više uslova zadovoljava rešenje, ako je temperatura kristala reda $10K$.

Kod većeg broja elementarnih ćelija N u kristalu suma se može zameniti integralom i na taj način, u saglasnosti sa (2.35), dobija se za (2.34) sledeći izraz:

$$F = \frac{3\, v\, N\, \Theta}{2\, \pi^2\, \overline{V}^3} \int_0^\infty \ln\left(1 - e^{-\frac{\hbar\,\Omega}{\Theta}}\right) \Omega^2\, d\Omega\,.$$

Uvodjenjem promenljive $X = \frac{\hbar\,\Omega}{\Theta}$ i integracijom po frekvenciji dobija se:

$$F = -\frac{v\, N \pi^2\, \Theta^4}{30\, (\hbar\, \overline{V})^3}\,. \tag{2.36}$$

Prema tome, ukupna energija fonona pri temperaturi Θ jednaka je:

$$E = -\,\Theta^2\, \frac{\partial}{\partial\Theta}\left(\frac{F}{\Theta}\right) = \frac{v\, \pi^2\, N\, \Theta^4}{10\, (\hbar\, \overline{V})^3}\,, \tag{2.37}$$

a toplotni kapacitet jedinične zapremine kristala je:

$$C_V = \frac{1}{v\, N}\, \frac{\partial E}{\partial \Theta} = \frac{2\, \pi^2\, k_B}{5\, (\hbar\, V)^3}\, \Theta^3\,. \tag{2.38}$$

Visoke temperature

Ako je zadovoljena nejednakost $\hbar\, \Omega_\alpha(\vec{k}) \ll \Theta$, za sve fonone, to izraz (2.34) se može zameniti približnim izrazom:

$$F = \Theta \sum_{\vec{k},\alpha} \ln\left(\frac{\hbar\, \Omega_\alpha(\vec{k})}{\Theta}\right)\,. \tag{2.39}$$

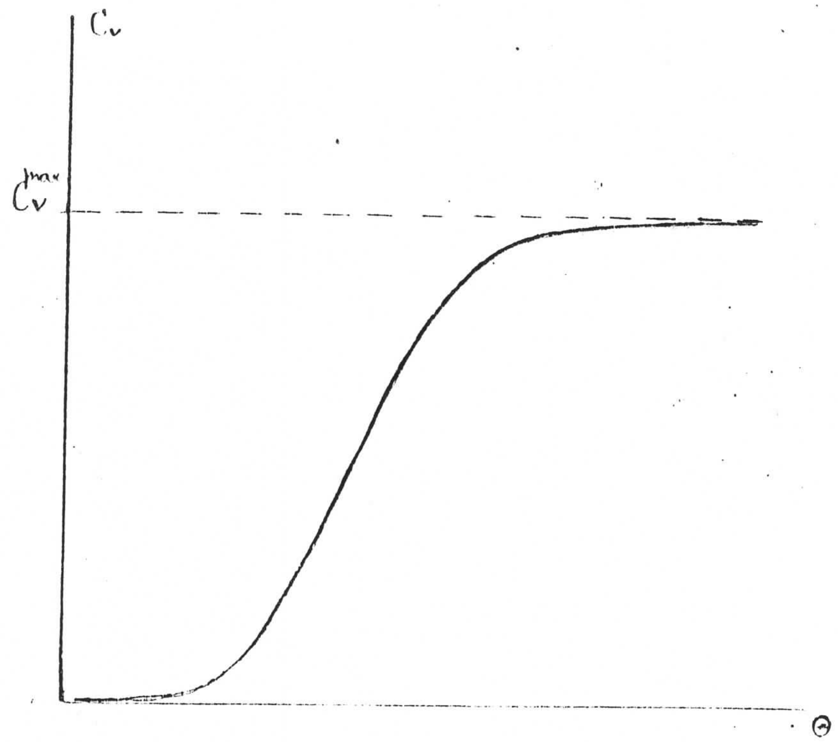
U tom slučaju ukupna energija je jednaka:

$$E = 3\,(N\sigma - 1)\,\Theta \cong 3\, N\, \sigma\, \Theta\,,$$

gde ja σ broj atoma u elementarnoj ćeliji kristala.

Toplotni kapacitet jedinične zapremine je onda dat izrazom:

$$C_V^{max} = \frac{3\, \sigma\, k_B}{v}\,. \tag{2.40}$$



Slika 2.2

Srednje temperature

Pri srednjim temperaturama izračunavanje slobodne energije fonona pomoću izraza (2.34) se bazira na sledećim uprošćenjima.
a) Pri izračunavanju doprinosa slobodnoj energiji fonona optičkih grana oscilovanja zanemaruje se zavisnost njihove frekvencije od talasnog vektora, tj. uzima se $\Omega_\alpha(\vec{k}) = \Omega_{\alpha_0}$. Tada je:

$$F_{op} = \Theta N \sum_{\alpha} \ln \left(1 - e^{-\frac{\hbar \Omega_{\alpha_0}}{\Theta}} \right) ,$$

gde se sumiranje prostire na $(3\sigma - 3)$ grane optičkih oscilacija kristala.
b) Pri izračunavanju doprinosa slobodnoj energiji fonona akustičkih grana koristi se Debajeva aproksimacija, koja se sastoji u sledećem:

$$\hbar\, \Omega_\alpha(\vec{k}) = \begin{cases} \overline{v}_{\vec{k}} , & za \quad k \leq \frac{\Omega_{max}}{\overline{v}} \\ 0 , & za \quad k > \frac{\Omega_{max}}{\overline{v}} \end{cases} \qquad (2.41)$$

gde je $\overline{v}$ - srednja brzina akustičkih fonona.

Maksimalna frekvencija Ω_{max} se odredjuje iz uslova:

$$\Omega_{max} = \overline{v} \left(\frac{6\,\pi^2}{v} \right)^{1/3} .$$

Tada se slobodna energija akustičkih fonona izražava kao:

$$F_{ak} = \frac{9\,v\,N\,\Theta}{\Omega_{max}^3} \int_0^{\Omega_{max}} \Omega^2 \ln\left(1 - e^{-\frac{\hbar\,\Omega}{\Theta}}\right) d\Omega .$$

Uvodjenjem promenljive $X = \hbar\Omega/\Theta$ i Debajeve temperature $\Theta_D = \hbar\;\Omega_{max}$, posle integracije konačno se dobija:

$$F_{ak} = v\,N\,\Theta\,\left\{ 3\,\ln\left(1 - e^{-\xi}\right) - D(\xi) \right\} , \tag{2.42}$$

gde je $D(\xi)$ - Debajeva funkcija, koja ima sledeće granične vrednosti:

$$D(\xi) = \begin{cases} 1 - \frac{3}{8}\xi + \frac{1}{20}\,\xi^2 , & za \quad \xi \ll 1 \\ \frac{\pi^4}{5\,\xi^3} + O\left(e^{-\xi}\right) , & za \quad \xi \gg 1 \end{cases}$$

Ukupna energija akustičkih fonona u kristalu je:

$$E = 3\,v\,N\,\Theta\;D(\xi) , \tag{2.43}$$

a toplotni kapacitet jedinične zapremine kristala:

$$C_v = 3\,k_B \left[D(\xi) + \Theta\,\frac{\partial D(\xi)}{\partial \Theta} \right] . \tag{2.44}$$

Kod niskih i visokih temperatura za toplotni kapacitet se dobija:

$$C_v = \begin{cases} 3\,k_B\,\left(1 - \frac{1}{20}\,\xi^2 + \ldots\right) , & za \quad \xi \ll 1 \\ \frac{12\,\pi^4}{5\,\xi^3} + O\left(e^{-\xi}\right) , & za \quad \xi \gg 1 \end{cases} \tag{2.45}$$

Jednostavnost Debajevog približavanja sastoji se u tome da se ceo spektar akustičkih fonona kristala izražava preko jednog parametra $\Theta_D = k_B\;T_D$.

3. TERMODINAMIČKO PONAŠANJE FILM - STRUKTURA

U ovom delu rada se uz pomoć hamiltonijana fononskog podsistema ispituju karakteristike idealnih film - struktura. U tu svrhu posmatra se tanak film izdvojen iz izotropne idealne kubne kristalne strukture sa konstantnom rešetke a. Film ima konačnu debljinu u z - pravcu. Znači da posmatrani film poseduje dve beskonačne granične površine paralelne XY - ravnima i to za $z = 0$ i $z = L$.

Zatim uz korišćenje standardnih izraza za U, C_V, F i S i upotrebom nadjenog zakona disperzije fonona dati su u obliku formula a zatim je dat grafički prikaz ponašanja termodinamičkih veličina u slučajevima niskih, srednjih i visokih temperatura.

3.1 Stanja i spektri fonona u filmovima

Hamiltonijan fononskog podsistema opisanog idealnog filma u aproksimaciji najbližih suseda dat je u obliku:

$$H_{if} = \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}} \frac{p_{\vec{n}}^2}{M} + \frac{1}{4}\sum_{\vec{n},\vec{\lambda}} C_{\vec{n},\vec{\lambda}}(\vec{u}_{\vec{n}} - \vec{u}_{\vec{n}+\vec{\lambda}})^2 \tag{3.1}$$

S obzirom na opisani model: $\vec{n} = a\sum_\alpha n_\alpha \vec{e}_\alpha$, $\vec{\lambda} = a\vec{e}_\alpha$, $\alpha = (x,y,z)$; $-\frac{N_\beta}{2} \leq n_\beta \leq \frac{N_\beta}{2}$, $N_\beta \sim 10^8$, $\beta = (x,y)$; $0 \leq n_z \leq N_z$ $(\equiv \frac{L}{a})$, hamiltonijan (3.1) može se razdvojiti na hamiltonijan po površini (H_p) i hamiltonijan po zapremini (H_z):

$$H_{if} = H_p + H_z \ , \tag{3.2}$$

uz uslov $C_{\alpha\alpha,i} = C_{\alpha\alpha}$, $i = -1, 0, 1, N_z, N_z - 1, N_z + 1$. Kako su slojevi za $n_z \leq -1$ i za $n_z \geq N_z + 1$ odsutni, moramo uzeti sledeće:

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

ali i:

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

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

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

$$H_p = \frac{1}{2M}\sum_{\alpha}\sum_{n_x,n_y}[p^2_{\alpha,n_x,n_y,o} + p^2_{\alpha,n_x,n_y,N_z}] + \frac{1}{4}\sum_{\alpha} C_{\alpha\alpha}\sum_{n_x,n_y} \times$$

$$\times \Big\{ 2u^2_{\alpha,n_x,n_y,o} + 2u^2_{\alpha,n_x,n_y,N_z} + (u_{\alpha n_x,n_y,N_z-1} - u_{n_x,n_y,N_z})^2 + (u_{\alpha,n_x,n_y,1} - u_{\alpha,n_x,n_y,o})^2 +$$

$$+(u_{\alpha,n_x,n_y,o} - u_{\alpha,n_x+1,n_y,o})^2 + (u_{\alpha,n_x,n_y,o} - u_{\alpha,n_x-1,n_y,o})^2 + (u_{\alpha,n_x,n_y,o} - u_{\alpha,n_x,n_y+1,o})^2 +$$

$$+(u_{\alpha,n_x,n_y,o} - u_{\alpha,n_x,n_y-1,o})^2 + (u_{\alpha,n_x,n_y,N_z} - u_{\alpha,n_x+1,n_y,N_z})^2 + (u_{\alpha,n_x,n_y,N_z} - u_{\alpha,n_x-1,n_y,N_z})^2 +$$

$$+(u_{\alpha,n_x,n_y,N_z} - u_{\alpha,n_x,n_y+1,N_z})^2 + (u_{\alpha,n_x,n_y,N_z} - u_{\alpha,n_x,n_y-1,N_z})^2 \Big\} \tag{3.3}$$

a izraz za zapreminski hamiltonijan je oblika:

$$H_z = \frac{1}{2M}\sum_{\alpha}\sum_{n_x,n_y} p^2_{\alpha,n_x,n_y,n_z} + \sum_{\alpha}\frac{C_{\alpha\alpha}}{4}\times$$

$$\times \sum_{n_x,n_y}\Big\{ \sum_{n_z=1}^{N_z-1}[(u_{\alpha,n_x+1,n_y,n_z} - u_{\alpha,n_x,n_y,n_z})^2 + (u_{\alpha,n_x-1,n_y,n_z} - u_{\alpha,n_x,n_y,n_z})^2 +$$

$$+(u_{\alpha,n_x,n_y+1,n_z} - u_{\alpha,n_x,n_y,n_z})^2 + (u_{\alpha,n_x,n_y-1,n_z} - u_{\alpha,n_x,n_y,n_z})^2] +$$

$$+\sum_{n_z=2}^{N_z-2}[(u_{\alpha,n_x,n_y,n_z+1} - u_{\alpha,n_x,n_y,n_z})^2 + (u_{\alpha,n_x,n_y,n_z-1} - u_{\alpha,n_x,n_y,n_z})^2] +$$

$$+(u_{\alpha,n_x,n_y,N_z-1} - u_{\alpha,n_x,n_y,N_z-2})^2 + (u_{\alpha,n_x,n_y,1} - u_{\alpha,n_x,n_y,2})^2 \Big\} \tag{3.4}$$

Da bi se rešio svojstveni problem hamiltonijana (3.4) formiraju se jednačine kretanja za operatore u i p:

$$i\hbar\dot{u}^{\beta}_{\vec{m}} = [u^{\beta}_{\vec{m}}, H_{if}]\ ; \quad i\hbar\dot{p}^{\beta}_{\vec{m}} = [p^{\beta}_{\vec{m}}, H_{if}]\ ; \quad \vec{m} \equiv (m_x, m_y, m_z)\ . \tag{3.5}$$

Uzimajući u obzir komutacione relacije za operatore pomeraja u i impulsa p :

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

mogu se izračunati odgovarajući komutatori iz (3.5) i ove dve jednačine spojiti u jednu, koja sadrži samo diferencijalnu jednačinu za odredjivanje operatora pomeraja u. Na taj način se dobija sledeći sistem jednačina za $n_z = 0$:

$$\ddot{u}_{\beta,m_x,m_y,o} = \frac{\dot{p}_{\beta,m_x,m_y,o}}{M} = [p_{\beta;m_x,m_y,0} \ , H_{if}] \ . \tag{3.6}$$

Ako se obeleži $\frac{C_{\beta\beta}}{M} = \Omega^2_{\beta\beta}$ i izračunava navedeni komutator umesto (3.6) dobijamo jednačinu:

$$\ddot{u}_{\alpha,n_x,n_y,o} - \Omega^2_{\alpha\alpha} \Big\{ u_{\alpha,n_x+1,n_y,o} + u_{\alpha,n_x-1,n_y,o} - 2u_{\alpha,n_x,n_y,o} + u_{\alpha,n_x,n_y+1,o} +$$

$$+ u_{\alpha,n_x,n_y-1,o} - 2u_{\alpha,n_x,n_y,o} + u_{\alpha,n_x,n_y,1} - 2u_{\alpha,n_x,n_y,o} \Big\} = 0 \tag{3.7}$$

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

$$\ddot{u}_{\alpha,n_x,n_y,n_z} - \Omega^2_{\alpha\alpha} \Big\{ u_{\alpha,n_x+1,n_y,n_z} + u_{\alpha,n_x-1,n_y,n_z} - 2u_{\alpha,n_x,n_y,n_z} + u_{\alpha,n_x,n_y+1,n_z} +$$

$$+ u_{\alpha,n_x,n_y-1,n_z} - 2u_{\alpha,n_x,n_y,n_z} + u_{\alpha,n_x,n_y,n_z+1} - u_{\alpha,n_x,n_y,n_z-1} - 2u_{\alpha,n_x,n_y,n_z} \Big\} = 0 \tag{3.8}$$

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

$$\ddot{u}_{\alpha,n_x,n_y,N_z} - \Omega^2_{\alpha\alpha} \Big\{ u_{\alpha,n_x+1,n_y,N_z} + u_{\alpha,n_x-1,n_y,N_z} - 2u_{\alpha,n_x,n_y,N_z} + u_{\alpha,n_x,n_y+1,N_z} +$$

$$+ u_{\alpha,n_x,n_y-1,N_z} - 2u_{\alpha,n_x,n_y,N_z} + u_{\alpha,n_x,n_y,N_z-1} - 2u_{\alpha,n_x,n_y,n_z} \Big\} = 0 \tag{3.9}$$

Rešenje sistema jednačina (3.7), (3.8) i (3.9) za fononske pomeraje moramo tražiti u obliku superpozicije proizvoda nepoznate funkcije (duž z - ose) i harmonijske funkcije položaja (u XY ravni), tj.

$$u_{\alpha,\vec{n}}(t) = \sum_{k_x,k_y} \sum_{k_z} A_{\alpha,n_z}(k_z) \Big\{ b_{\alpha,k_x,k_y,k_z} e^{ia(k_x n_x + k_y n_y) - it\omega_{\alpha,\vec{k}}} +$$

$$+ b^{+}_{\alpha,k_x,k_y,k_z} e^{-ia(k_x n_x + k_y n_y) + it\omega_{\alpha,\vec{k}}} \Big\} \ , \tag{3.10}$$

gde su A za sada neodredjene amplitude, $b_{\alpha,\vec{k}}$ i $b^{+}_{\alpha,\vec{k}}$ fononski anihilacioni i kreacioni operatori, a ω fononske frekvencije.

S obzirom da se posmatra prosta kubna rešetka gde je, $a_x = a_y = a_z = a$, ako se izvrši razvoj za $u_{\alpha,\vec{n}}$ i zamene ovi izrazi u jednačine (3.7), (3.8) i (3.9) dobija se umesto (3.7), tj. za $n_z = 0$:

$$A_{\alpha,1}(k_z) + \varrho_{\alpha,\vec{k}} A_{\alpha,o}(k_z) = 0 , \tag{3.11}$$

gde je:

$$\varrho_{\alpha,\vec{k}} = \frac{\omega^2_{\alpha,\vec{k}}}{\Omega^2_{\alpha\alpha}} - 4\sin^2\frac{ak_x}{2} - 4\sin^2\frac{ak_y}{2} - 2 . \tag{3.12}$$

Na isti način zamenom odgovarajućih izraza u jednačinu (3.8) za $1 \leq n_z \leq N_z - 1$ dobija se jednačina:

$$A_{\alpha,n_z+1}(k_z) + A_{\alpha,n_z-1}(k_z) + \varrho_{\alpha,\vec{k}} A_{\alpha,n_z} = 0 . \tag{3.13}$$

Konačno, zamenom odgovarajućih izraza u (3.9) dobija se jednačina za $n_z = N_z$:

$$A_{\alpha,N_z-1}(k_z) + \varrho_{\alpha,\vec{k}} A_{\alpha,N_z}(k_z) = 0 . \tag{3.14}$$

Na taj način se dobija sistem od $N_z + 1$ homogenih algebarskih jednačina:

$$\begin{gathered}
A_{\alpha,1}(k_z) + \varrho_{\alpha,\vec{k}} A_{\alpha,o}(k_z) = 0 , \\
A_{\alpha,2}(k_z) + A_{\alpha,0}(k_z) + \varrho_{\alpha,\vec{k}} A_{\alpha,1}(k_z) = 0 , \\
A_{\alpha,3}(k_z) + A_{\alpha,1}(k_z) + \varrho_{\alpha,\vec{k}} A_{\alpha,2}(k_z) = 0 , \\
\cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \\
\cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \\
\cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \\
A_{\alpha,n_z+1}(k_z) + A_{\alpha,n_z-1}(k_z) + \varrho_{\alpha,\vec{k}} A_{\alpha,n_z}(k_z) = 0 , \\
\cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \\
\cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \\
\cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \\
A_{\alpha,N_z-1}(k_z) + A_{\alpha,N_z-3}(k_z) + \varrho_{\alpha,\vec{k}} A_{\alpha,N_z-2}(k_z) = 0 , \\
A_{\alpha,N_z}(k_z) + A_{\alpha,N_z-2}(k_z) + \varrho_{\alpha,\vec{k}} A_{\alpha,N_z-1}(k_z) = 0 , \\
A_{\alpha,N_z-1}(k_z) + \varrho_{\alpha,\vec{k}} A_{\alpha,N_z}(k_z) = 0 .
\end{gathered} \tag{3.15}$$

Da bi ovaj sistem homogenih jednačina imao netrivijalnih rešenja, mora determinanta tog sistema biti jednaka nuli:

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

Rešenje ove determinante predstavlja jedan od oblika Čebiševljevih polinoma druge vrste i može se pisati u obliku:

$$D_{N_z+1}(\varrho) = \frac{\sin[(N_z+2)\xi_{\nu_z}]}{\sin \xi_{\nu_z}} \ ; \qquad \xi_{\nu_z} \neq 0 \ , \tag{3.16}$$

pri čemu su:

$$\varrho = 2\cos \xi_{\nu_z} \ ; \quad \nu_z = 1, 2, 3, \ \dots, N_z + 1 \ . \tag{3.17}$$

Izjednačavajući determinantu sa nulom, dobijamo:

$$\xi_{\nu_z} = \frac{\pi \nu_z}{N_z + 2} \ . \tag{3.18}$$

Zamenom izraza (3.17), (3.18) u izraz (3.12) dobija se:

$$2\cos \frac{\pi \nu_z}{2(N_z+2)} = \frac{\omega^2_{\alpha,k_x,k_y,\nu_z}}{\Omega^2_{\alpha\alpha}} - 4\left\{\sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y}{2}\right\} - 2 \ .$$

Ovaj izraz može se rešiti po nepoznatim fononskim frekvencijama ω:

$$\omega_{\alpha,k_x,k_y,\nu_z} = 2\Omega_{\alpha\alpha}\sqrt{\sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y}{2} + \cos^2 \frac{\pi \nu_z}{2(N_z+2)}} \ , \tag{3.19}$$

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

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

Konačan izraz za tražene fononske frekvencije možemo napisati u obliku:

$$\omega_{\alpha,\vec{k}} = 2\Omega_{\alpha\alpha}\sqrt{\sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y}{2} + \sin^2 \frac{ak_z}{2}} \ , \tag{3.20}$$

pri čemu je:

$$k_z = \frac{\pi}{a}\frac{\mu_z}{N_z+2}\ ; \quad \mu_z = 1,2,3,\ \ldots, N_z+1 \tag{3.21}$$

Uočava se da, za razliku od k_x i k_y čija je minimalna vrednost jednaka nuli, $k_z^{min} = \frac{1}{N_z+2}\frac{\pi}{a} > 0$, jer je $N_z \ll (N_x, N_y)$. Ako se sistem jednačina (3.15) podeli sa nultom amplitudom A_o dobija se ovaj sistem jednačina u novom obliku:

$$B_1 + \varrho = 0\ , \qquad \text{za}\ n_z = 0 \tag{3.22}$$

$$B_2 + \varrho B_1 + 1 = 0\ , \qquad \text{za}\ n_z = 1 \tag{3.23}$$

$$B_{n_z+1} + B_{n_z-1} + \varrho B_{n_z} = 0\ , \qquad \text{za}\ 2 \le n_z \le N_z - 1 \tag{3.24}$$

gde je $B_{n_z} \equiv B_{\alpha,n_z} = A^{-1}_{\alpha,o}A_{\alpha,n_z}$. Jednačina (3.24) je zadovoljena za:

$$B_{n_z} = (-1)^{n_z}\ \{p\sin(\xi n_z) + q\sin[\xi(n_z-1)]\}\ , \tag{3.25}$$

a na osnovu toga i (3.17) sledi:

$$B_1 = -p\sin\xi\ ; \quad B_2 = p\sin(2\xi) + q\sin\xi\ .$$

Zamenom ovih izraza u (3.22) i (3.23) dobijaju se koeficijenti p i q kao:

$$p = \frac{\varrho}{\sin\xi}\ ; \quad q = -\frac{1}{\sin\xi}\ ; \quad \xi \neq 0$$

Vraćajući izraze za p i q u (3.25) dobija se:

$$B_{n_z} = (-1)^{n_z}\ \frac{\sin[\xi(n_z+1)]}{\sin\xi}\ , \tag{3.26}$$

iz čega sledi:

$$A_{\alpha,n_z,\nu_z} = (-1)^{n_z}\ \frac{\sin(n_z+1)\xi_{\nu_z}}{\sin\xi_{\nu_z}} A_{\alpha;0}\ . \tag{3.27}$$

Kombinovanjem jednačina (3.27), (3.10) i (3.2) svodi se hamiltonijan H_{if} na dijagonalni oblik:

$$H_{if} = \sum_{\alpha,\vec{k}} E_{\alpha,\vec{k}}\left(b^+_{\alpha,\vec{k}}b_{\alpha,\vec{k}} + \frac{1}{2}\right)\ . \tag{3.28}$$

Konačno, zakon disperzije za fonone u tankom nedeformisanom filmu na osnovu (3.20) i (3.21) je:

$$E_{\alpha,\vec{k}} = \hbar\omega_{\alpha,\vec{k}} = 2E_o\sqrt{\sin^2\frac{ak_x}{2} + \sin^2\frac{ak_y}{2} + \sin^2\frac{ak_z}{2}}\ , \tag{3.29}$$

gde je $E_o = \hbar\Omega_{\alpha\alpha}$. U skladu sa tim dobija se konačan izraz za fononske pomeraje u obliku:

$$u_{\alpha,\vec{n}}(0) = \sum_{\vec{k}}(-1)^{n_z}\sqrt{\frac{\hbar}{MN_xN_y(N_z+2)\omega_{\alpha,\vec{k}}}}\left\{b_{\alpha,\vec{k}}e^{ia(k_xn_x+k_yn_y)}+\right.$$
$$\left.+b^+_{\alpha,\vec{k}}e^{-ia(k_xn_x+k_yn_y)}\right\}\cdot\sin[(n_z+1)ak_z]\ . \tag{3.30}$$

Uporedjujući dobijene rezultate sa odgovarajućim idealnim beskonačnim strukturama može se zaključiti sledeće:

a) mehaničke vibracije u idealnoj beskonačnoj strukturi su ravni talasi u svim smerovima a mehaničke vibracije u tankom filmu su spoj stojećih talasa u z - pravcu i ravnih talasa u XY ravnima;

b) amplituda pomaka u filmovima je $\sim 10^4\sqrt{\frac{2}{N_z}}$ ($N_z \sim 10^3 - 10^4$) puta veća nego amplituda pomaka u idealnim beskonačnim strukturama, što sledi iz (3.30);

c) tri akustičke frekvencije u masenim strukturama teže nuli kada k teži nuli, sa druge strane, minimalne frekvencije u tankom filmu su date kao:

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

To znači da fononi u tankim filmovima poseduju fononski gep $\hbar\omega_{\alpha;min}$, odakle sledi da je aktivaciona temperatura filma:

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

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

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

3.2 Termodinamika fononskih filmova

S obzirom da su osobine anizotropnih struktura uslovljene promenom zakona disperzije, potrebno je posmatrati ponašanje nekih termodinamičkih veličina u cilju dobijanja potpunije slike o tim osobinama.

Uzimajući da kada $k \to 0$ (u dugotalasnoj aproksimaciji), energije sve tri fononske grane ostaju različite od nule možemo koristiti jednačinu disperzije (3.29) koju možemo uprostiti uvodjenjem aproksimacija: $sin^2\alpha \cong \alpha^2$; $k^2 = k_x^2 + k_y^2$; $\Delta = ak_z^{min}\varepsilon_0$. Tada jednačina dobija oblik:

$$E\,(\vec{k}) \;=\; \sqrt{a^2\,k^2\,\varepsilon_0 + \Delta^2}\,. \tag{3.31}$$

Medjutim, treba posebno istaći da je provera fononskog zakona disperzije, kod veoma malog k, praktično nemoguća, pa se potvrda postojanja fononskog gepa ogleda npr. merenjem niskotemperaturskih specifičnih toplota u filmu i u odgovarajućoj idealnoj strukturi. To će ujedno dati odgovor, da li postoji gep u fononskom spektru tankih filmova.

U skladu sa ovim, analiziraćemo specifičnu toplotu, ali pre toga moramo izračunati unutrašnju energiju. Ako podjemo od standardnog oblika unutrašnje energije:

$$U_f \;=\; 3\sum_{k_x,k_y,k_z} E\,(\vec{k})\left[e^{\frac{E(\vec{k})}{\Theta}} - 1\right]^{-1};\qquad \Theta = k_b\,T\,. \tag{3.32}$$

Prelaz sa sume na integral se izražava na sledeći način:

$$\sum_{k_x,k_y,k_z} \to 3\,(N_z+1)\sum_{n_x,n_y} \to \frac{3\,N_x\,N_y\,(N_z+1)\,a^2}{4\,\pi^2}\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{k_{max}} k\,dk\,, \tag{3.33}$$

i ako ga iskoristimo u jednačini (3.32) dobijamo:

$$U_f = \frac{3\,N_x\,N_y\,(N_z+1)\,a^2}{4\,\pi^2}\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{k_{max}} k\,\frac{\sqrt{a^2\,k^2\,\varepsilon_0+\Delta^2}}{e^{\frac{\sqrt{a^2\,k^2\,\varepsilon_0+\Delta^2}}{\Theta}} - 1}\,dk\,. \tag{3.34}$$

Integral se rešava uvodjenjem smene $(a^2\,k^2\,\varepsilon_0 + \Delta^2) = t^2$, pa sledi:

$$U_f = 3\,\frac{N_f}{2\,\pi\,\varepsilon_0^2}\int_{\Delta}^{\sqrt{E_D^2+\Delta^2}} \frac{t^2}{e^{\frac{t}{\Theta}} - 1}\,dt\,, \tag{3.35}$$

pri čemu su: $E_D = \varepsilon_0\,a\,k_{max}$ i $N_f = N_xN_y(N_z+1)$.

Daljim uprošćavanjem dobijamo:

$$U_f = 3 \frac{N_f}{2\pi \varepsilon_0^2} \int_{\Delta}^{\delta\Delta} \frac{t^2}{e^{\frac{t}{\Theta}} - 1} dt , \tag{3.36}$$

gde je $\delta\Delta = \sqrt{E_D^2 + \Delta^2}$. Ako se podintegralna funkcija razvije u red:

$$\frac{1}{e^{\frac{t}{\Theta}} - 1} = \sum_{j=1}^{\infty} e^{-\frac{jt}{\Theta}} ,$$

i zamenom u (3.34) se dobija:

$$U_f = \frac{3 N_f}{2\pi \varepsilon_0^2} \sum_{j=1}^{\infty} \int_{\Delta}^{\delta\Delta} t^2 \, e^{-\frac{jt}{\Theta}} dt . \tag{3.37}$$

Integral se rešava parcijalnom integracijom:

$$\int_{\Delta}^{\delta\Delta} t^2 e^{-\frac{jt}{\Theta}} dt = \Theta \Delta^2 \left\{ \frac{1}{j} \left(e^{-\frac{j\Delta}{\Theta}} - \delta^2 e^{-\frac{j\Delta}{\Theta}} \right) + \right.$$

$$\left. + \frac{2\Theta}{\Delta j^2} \left(e^{-\frac{j\Delta}{\Theta}} - \delta^2 e^{-\frac{j\delta\Delta}{\Theta}} \right) + \frac{2\Theta^2}{\Delta^2 j^2} \left(e^{-\frac{j\Delta}{\Theta}} - \delta^2 e^{-\frac{j\delta\Delta}{\Theta}} \right) \right\} ,$$

i ako se njegovo rešenje zameni u (3.37) dobija se konačan izraz za **unutrašnju energiju** posmatranog sistema:

$$U_f = \frac{3 N_f \Delta^2}{2\pi \varepsilon_0^2} \Theta \left\{ \left[Z_1(X) - \delta^2 Z_1(\delta X) \right] + 2 \frac{1}{X} \left[Z_2(X) - \delta Z_2(\delta X) \right] + \right.$$

$$\left. +2 \left(\frac{1}{X} \right)^2 \left[Z_3(X) - Z_3(\delta X) \right] \right\} , \tag{3.38}$$

gde je $X = \frac{\Delta}{\Theta}$ i $Z_r(X) = \sum_{j=1}^{\infty} j^{-r} e^{-jX}$ - Disonova funkcija.

Za nalaženje specifične toplote kreće se od standardnog izraza:

$$C_f = \frac{1}{N_f} \frac{\partial U_f}{\partial T} = \frac{k_B}{N_f} \frac{\partial U_f}{\partial \Theta} . \tag{3.39}$$

Diferenciranjem ovog izraza po Θ dobija se:

$$\frac{\partial U_f}{\partial \Theta} = \frac{3\,N_f\,\Delta^2}{2\,\pi\,\varepsilon_0^2}\left\{\left[Z_1(X) - \delta^2 Z_1(\delta X)\right] + 2\,\frac{1}{X}\,\left[Z_2(X) - \delta Z_2(\delta X)\right] + \right.$$

$$\left. +2\left(\frac{1}{X}\right)^2 \left[Z_3(X) - Z_3(\delta X)\right]\right\} + \frac{3\,N_f\,\Delta^2}{2\,\pi\,\varepsilon_0^2}\,\Theta\left\{\left[\frac{\partial Z_1(X)}{\partial \Theta} - \delta^2\,\frac{\partial\,Z_1(X)}{\partial\,\Theta}\right] + \right.$$

$$+2\,\frac{1}{X}\,\left[\,Z_2(X) - \delta Z_2(\delta X)\,\right] + 2\,\frac{1}{X}\,\left[\frac{\partial Z_2(X)}{\partial \Theta} - \delta\,\frac{\partial Z_2(\delta X)}{\partial \Theta}\right] +$$

$$\left. +4\frac{1}{\Delta}\,\frac{1}{X}\,\left[Z_3(X) - Z_3(\delta X)\right] + 2\left(\frac{1}{X}\right)^2\left[\frac{\partial Z_3(X)}{\partial \Theta} - \frac{\partial Z_3(\delta X)}{\partial \Theta}\right]\right\}.$$

Znajući da je:

$$\frac{\partial Z_r(\frac{c}{\Theta})}{\partial \Theta} = \frac{c}{\Theta^2}\,Z_{r-1}\left(\frac{c}{\Theta}\right)\;;\quad r \geq 2\;;\quad c = \Delta\,,$$

i zamenom u (3.40) dobija se prvi izvod unutrašnje energije po Θ u obliku:

$$\frac{\partial U_f}{\partial \Theta} = \frac{3\,N_f\,\Delta^2}{2\,\pi\,\varepsilon_0^2}\left\{X\,\left[\left(e^{X} - 1\right)^{-1} - \delta^3\,\left(e^{-\delta X} - 1\right)^{-1}\right] + 3\left[Z_1(X) - \delta^2 Z_1(\delta X)\right] + \right.$$

$$\left. +6\,\frac{1}{X}\,\left[\,Z_2(X) - \delta Z_2(\delta X)\,\right] + 6\,\left(\frac{1}{X}\right)^2\,\left[Z_3(X) - Z_3(\delta X)\,\right]\right\}, \tag{3.40}$$

čijom zamenom u (3.39) se dobija konačan izraz za **specifičnu toplotu** po jediničnoj ćeliji za posmatranu strukturu:

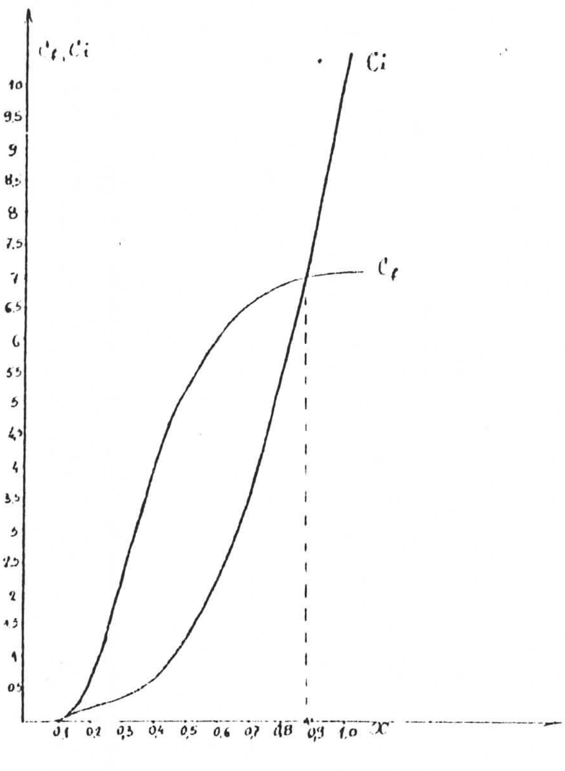
$$C_f = \frac{3\,k_B\,\Delta^2}{2\,\pi\,\varepsilon_0^2}\,\left\{X\,\left[\,\left(e^{X} - 1\right)^{-1} - \delta^3\,\left(e^{\delta X} - 1\right)^{-1}\,\right] + 3\left[Z_1(X) - \delta^2 Z_1(\delta X)\right] + \right.$$

$$\left. +6\,\frac{1}{X}\,\left[\,Z_2(X) - \delta Z_2(\delta X)\,\right] + 6\,\left(\frac{1}{X}\right)^2\,\left[Z_3(X) - Z_3(\delta X)\,\right]\right\}. \tag{3.41}$$

Analizom izraza za specifičnu toplotu može se u očiti da se izraz sastoji iz dva dela:

1) Prvi deo, ima inverznu eksponencijalnu zavisnost, $\left(e^X - 1\right)^{-1}$ ili $\left(e^{\delta X} - 1\right)^{-1}$, od temperature Θ i pokazuje kako se specifična toplota ponaša u ekstremnim slučajevima, kada su temperature veoma niske ($\sim 0K$) i kada su temperature veoma visoke (sobna temperatura).

2) Drugi deo (izražen preko Disonovih funkcija $Z_r(X)$), pokazuje kako se specifična toplota ponaša u oblasti srednjih temperatura (znatno manjih od temperatura faznog prelaza). Ovaj član pretpostavlja linearnu zavisnost specifične toplote od temperature.



Slika 3.1

Na grafiku su predstavljene specifične toplote masivne (idealne) i film strukture u zavisnosti od relativne temperature $x = \Theta/\Delta$. Vidi se da je od $x \approx 0.1$ pa sve do temperature $x \approx 0.9$ specifična toplota filma viša od iste za masivne strukture, što znači da je zagrevanje filma u tom intervalu temperatura lakše nego odgovarajućih masivnih struktura.

Pored unutrašnje energije i specifične toplote može se posmatrati ponašanje i slobodne energije kao i entropije posmatranog sistema.

Naime, slobodna energija se definiše kao:

$$F_f = \Theta \sum_{\vec{k},\alpha} \ln\left[1 - e^{-\frac{E(\vec{k})}{\Theta}}\right] , \tag{3.42}$$

i ako se koristi zakon disperzije fonona (3.29), tada prelaskom sa sume na integral dat izrazom (3.33), gornji izraz se svodi na:

$$F_f = \frac{3\,N_x\,N_y\,(N_z+1)\,a^2}{4\,\pi^2}\,\Theta \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{k_D} k\,\ln\left\{1 - e^{-\frac{\sqrt{\varepsilon_0^2\,a^2\,k^2+\Delta^2}}{\Theta}}\right\} dk , \tag{3.43}$$

koji posle smene $(\varepsilon_0^2\,a^2\,k^2 + \Delta^2) = t^2$ dobija prostiji oblik:

$$F_f = \frac{3\,N_f}{2\,\pi\,\varepsilon_0^2}\,\Theta \int_{\Delta}^{\sqrt{E_D^2+\Delta^2}} t\,\left\{1 - e^{-\frac{t}{\Theta}}\right\} dt ,$$

gde su: $E_D = \varepsilon_0\,a\,k_D$; $a\,k_D = (6\pi^2)^{\frac{1}{3}}$; $N_f = N_x N_y (N_z + 1)$.

Parcijalnom integracijom gornjeg izraza se dobija:

$$F_f = \frac{3\,N_f}{4\,\pi\,\varepsilon_0^2}\,\Theta \left\{ t^2\,\ln\left(1 - e^{-\frac{t}{\Theta}}\right)\Big|_{\Delta}^{\delta\Delta} - \frac{3\,N_f}{4\,\pi\,\varepsilon_0^2} \sum_{j=1}^{\infty} \int_{\Delta}^{\delta\Delta} t^2\,e^{-\frac{j\,t}{\Theta}}\,dt \right\} , \tag{3.44}$$

gde je $\delta\,\Delta = \sqrt{E_D^2 + \Delta^2}$.

Drugi deo ovog izraza u zagradi je proporcionalan izrazu za unutrašnju energiju (3.38), pa možemo koristiti rešenja koja slede iz (3.39). Tada se konačan izraz za **slobodnu energiju** dobija u obliku:

$$F_f = -\,\frac{3\,N_f\,\Delta^2}{4\,\pi\,\varepsilon_0^2}\,\Theta\,\left[\ln\left(1 - e^{-X}\right) - \delta^2\,\ln\left(1 - e^{-\delta X}\right)\right] - \frac{1}{2}\,U_f . \tag{3.45}$$

Možemo zapaziti da se slobodna energija posmatranog sistema sastoji iz dva člana:

a) prvi član je dat u obliku funkcije prirodnog logaritma,

b) drugi član predstavlja unutrašnju energiju datog sistema.

Da bi se posmatralo ponašanje entropije posmatranog sistema moramo potražiti izvod slobodne energije po temperaturi. Standardni izraz za entropiju je dat u obliku:

$$S_f = -\,\frac{1}{N_f}\,\frac{\partial F_f}{\partial T} = -\,\frac{k_B}{N_f}\,\frac{\partial F_f}{\partial \Theta} . \tag{3.46}$$

Ako se u izrazu (3.45) prvi član obeleži sa F_1 a drugi član zadrži istu oznaku onda nalaženje izvoda datog izraza se svodi na traženje izvoda samo prvog člana po Θ, dok je izvod drugog člana dat izrazom (3.40), tj. :

$$\frac{\partial F_f}{\partial \Theta} = \frac{\partial F_1}{\partial \Theta} - \frac{1}{2} \frac{\partial U_f}{\partial \Theta} . \tag{3.47}$$

Parcijalni izvod prvog člana F_1 po temperaturi Θ je:

$$\frac{\partial F_1}{\partial \Theta} = \frac{3 N_f \Delta^2}{4 \pi \varepsilon_0^2} X \left[\left(e^X - 1 \right)^{-1} - \delta^3 \left(e^{\delta X} - 1 \right)^{-1} \right] -$$

$$- \frac{3 N_f \Delta^2}{4 \pi \varepsilon_0^2} \left[\ln \left(1 - e^{-X} \right) + \delta^2 \ln \left(1 - e^{-\delta X} \right) \right] . \tag{3.48}$$

Zamenom (3.40) i (3.47) u (3.46) dobija se konačan izraz za **entropiju** sistema u obliku:

$$S_f = \frac{3 k_B \Delta^2}{4 \pi \varepsilon_0^2} \left\{ \left[ln \left(1 - e^{-X} \right) + \delta^2 ln \left(1 - e^{-\delta X} \right) \right] + 3 \left[Z_1(X) - \delta^2 Z_1(\delta X) \right] + \right.$$

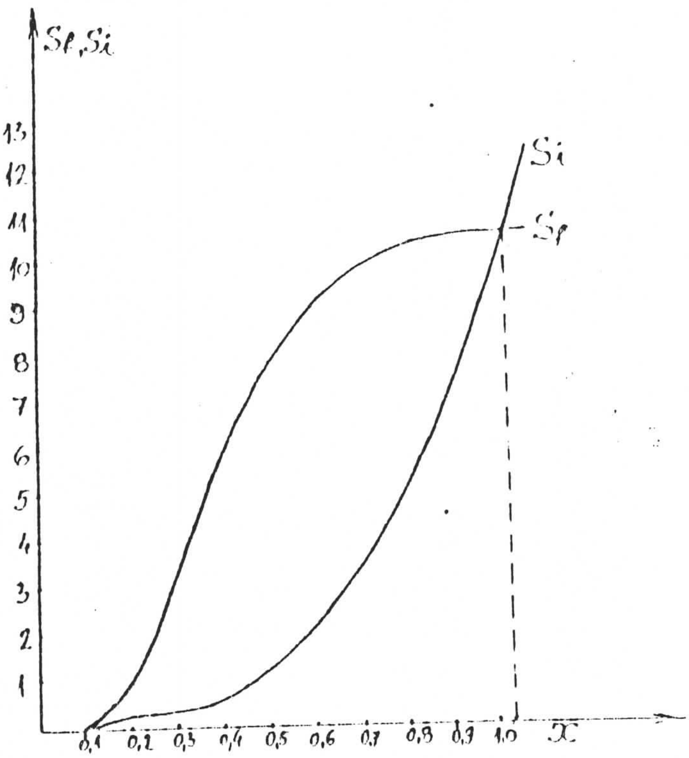
$$\left. +6 \frac{1}{X} \left[Z_2(X) - \delta Z_2(\delta X) \right] + 6 \left(\frac{1}{X} \right)^2 \left[Z_3(X) - Z_3(\delta X) \right] \right\} . \tag{3.49}$$

U izrazu za entropiju se zapaža da, kao i kod specifične toplote, postoje dva člana:

a) prvi član ima logaritamsku zavisnost od temperature i odredjuje ponašanje entropije pri niskim i visokim temperaturama,

b) drugi član je odredjen Disonovim funkcijama $Z_r(X)$ i odredjuje ponašanje entropije pri srednjim temperaturama.

Na slici (3.2) je data grafička zavisnost entropije S od $\frac{\Theta}{\Delta}$:



Slika 3.2

Na grafiku su predstavljene entropije masivne (idealne) i film - strukture u zavisnosti od relativne temperature $x = \Theta/\Delta$. Vidi se da je od $x \approx 0.1$ pa sve do temperature $x \approx 1.0$ entropija filma viša od iste za masivne strukture, što znači da filmovi predstavljaju ne uredjenije strukture u tom intervalu temperatura nego odgovarajuće masivne strukture.

4. ZAKLJUČAK

Analizom termodinamičkog ponašanja fonona u idealnim i film - strukturama došlo se do sledećih zaključaka.

1. U intervalu temperatura $T \approx T_{\triangle}/10$ do $T \approx T_{\triangle}$, gde $T_{\triangle}$ odgovara energetskom fononskom gepu, fononska specifična toplota filma ima više vrednosti na istim temperaturama nego odgovarajuća masivna struktura. To znači da je zagrevanje filma u tom intervalu temperatura lakše nego odgovarajućih masivnih struktura.

2. U približno istom temperaturskom intervalu fononska entropija filma ima više vrednosti na istim temperaturama nego odgovarajuća masivna struktura. To znači da filmovi predstavljaju ne uredjenije strukture u tom intervalu temperatura nego odgovarajuće masivne strukture.

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

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

a) U filmovima se javljaju stojeći fononski talasi duž z - pravca što je odlika superprovodnika. U idealnim strukturama, gde imamo ravne talase, ove odlike nema.

b) Veće vrednosti amplituda fononskih pomeraja u filmovima ukazuju na mogućnost dugometnije fononske interakcije sa drugim pobudjenjima (elektronima ili šupljinama). To ima za posledicu veći radijus Kuperovih parova koji se ovde stvaraju.

c) Pojava energetskog gepa u fononskom spektru filmova znači da se sve do aktivacione temperature T_{ac} ovi sistemi ponašaju kao zamrznuti, bez mehaničkih vibracija koji bi stvarali otpor provodjenju električne struje.

d) Više vrednosti fononskih specifičnih toplota i fononskih entropija filmova ukazuju na ~~bolju~~ slabiju termodinamičku uredjenost filmova što je takodje odlika superprovodnog stanja sistema.

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

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

5. LITERATURA

1. B.S.Tošić, J.P.Šetrajčić, D.Lj.Mirjanić, Z.V.Bundalo, *Physica A* **184** (1992) 354.

2. M.Pantić, *Fononska stanja u strukturama sa narušenom simetrijom*, Mr teza, FF PMF Beograd 1993.

3. B.S.Tošić, *Statistička fizika* , PMF IF, Novi Sad 1978.

4. A.S.Davydov, *Teoriya tverdogo tela*, Nauka, Moskva 1976.

5. Ch.Kittel, *Uvod u fiziku čvrstog stanja*, Sav.Admin. Beograd 1970.