UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET
DEPARTMAN ZA FIZIKU

– DIPLOMSKI RAD –

OPERATORSKO REŠAVANJE DIFERENCNIH JEDNAČINA I FONONI U KRISTALNIM NANOSTRUKTURAMA

MENTOR
PROF.DR **JOVAN ŠETRAJČIĆ**
KANDIDAT
BACKOVIĆ DANILO

Novi Sad, 2005. godine

Predgovor

Savremena nauka materijala istražuje mogućnost „pojačavanja"određenih (potrebnih) i „prigušivanje" 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, eksperimentalni rezultati su prisutni i merna oprema može da ih prati, ali se u domenu teorijskih razmatranja (modelovanja i analitičkog rešavanja) veoma malo uradilo.

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 podsistema: kinetička i potencijalna energija.

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

Novi Sad, 20.06.2005.

Backović Danilo

Sadržaj

1 Uvod **4**

2 Elementi teorije diferencnih jednačina **5**

2.1 Diskretno diferenciranje i antidiferenciranje 5

3 Operatorsko rešavanje diferencnih jednačina **9**

3.1 Diferencne jednačine I reda 9

3.2 Diferencne jednačine II reda 9

3.3 Operatorsko rešavanje diferencne jednačine stanja kristalnih struktura 13

4 Mehaničke oscilacije u nanostrukturama **18**

4.1 Sistem vezanih oscilatora 18

4.2 Fononski model 20

4.3 Fononski podsistem u tankim kristalnim filmovima 23

4.3.1 Grinova funkcija tipa pomeraj-pomeraj 23

4.3.2 Grinova funkcija tipa impuls-impuls 29

4.4 Analiza nekih fizičkih karakteristika tankih filmova 30

4.4.1 Fononski zakon disperzije 30

4.4.2 Kinetička energija po slojevima 31

4.4.3 Potencijalna energija po slojevima 32

5 Zaključak **35**

6 L i t e r a t u r a **36**

1 Uvod

Savremena naučna istraživanja u fizici materijala okrenuta su ka ispitivanju neverovatnih mogućnosti promena karakteristika supstancija malih prostornih dimenzija. Građa takvih supstancija je nanostrukturna i odlučujući uticaj na njihove fizičke osobine imaju: postojanje graničnih i izmenjeni elementarni granični parametri.

Prostorno jako niskodimenzioni kristalni sistemi – nanostrukture(ultratanki filmovi, kvantne žice, grede, tačke i sl.) se danas široko istražuju. Tehnološki postupci za dobijanje nano uzoraka, napredovali su do te mere da je moguće izraditi slojeve manje od srednje dužine puta nosilaca naelektrisanja, reda veličine $1 - 10$ nm (epitaksija molekulskim snopom, naparavanje iz metal-organskih jedinjenja). Ove debljine su reda veličine fononske talasne dužine što stvara izmenjena i neočekivana svojstva materijala u odnosu na analogne masivne strukture. Ti makroskopski kvantni efekti (u smislu da je kvantnomehanički pristup neophodan ne samo za rešavanje kretanja sastavnih delova sistema, nego i za ponašanje sistema u celini) su od praktičnog značaja za opto/nano elektroniku. Sa fundamentalne strane, smatra se da upravo slojevite strukture kriju u sebi tajnu, još neobjašnjene visokotemperaturne superprovodljivosti.

Teorijska istraživanja u fizici čvrstog stanja bazirana su na postavkama modela i njihovoj analizi metodama koje su uvedene u statističku kvantnu fiziku – pozajmicom iz kvantne teorije polja. Kod prostorno neograničenih i translaciono invarijantnih kristalnih sistema ova „pozajmica" je mogla adekvatno da se upotrebi i valorizuje.

Međutim, u savremenoj nanotehnološki „izrežiranoj" slici, dimenziono kvantovanje (kvantni efekti usled malih prostornih dimenzija uzoraka) nalaže i zahteva precizniju, kvalitetniju i adekvatniju upotrebu matematičkog aparata. Kada su kristalni uzorci nano-dimenzija, jasno je da fizičke veličine koje karakterišu osobine posmatranog sistema definišu njihove skokovite (kvantne) promene od čvora do čvora kristalne rešetke. Sve karakteristike moraju da „odslikavaju" njihovu diskretnu kristalnu građu i promene na granicama ovih uzoraka su od fundamentalnog značaja za ponašanje i osobine celog uzorka. Umesto diferencijalno-integralnog aparata kojeg koristi klasična fizika, a prilagodila je i teorija izotropnih i neograničenih kristala, ovde se mogu primeniti samo postavke diferencnog računa.

Ovaj rad je, zbog toga, posvećen matematičkoj analizi iznalaženja rešenja onih tipova diferencnih jednačina koje se mogu javiti u teorijskim istraživanjima nanokristala. Kao primer razmatran je osnovni podsistem elementarnih pobuđenja – fononi u kristalnim nanofilmovima.

2 Elementi teorije diferencnih jednačina

2.1 Diskretno diferenciranje i antidiferenciranje

Diskretan izvod funkcije diskretne promenljive n po toj promenljivoj u reprezentaciji translacionih operatora se definiše kao:

$$\frac{\Delta F_n}{\Delta n} \stackrel{\text{def}}{=} F_{n+1} - F_n. \tag{2.1}$$

Priraštaj (diferencija) argumenta je $\Delta n = 1$, tako da se u formulama izostavlja; ovde se navodi samo radi jasnoće po kojoj promenljivoj se diferencira. U suštini, svejedno je da li operišemo sa pojmom diskretnog izvoda $(\Delta/\Delta n)$ ili pojmom diferencije funkcije (Δ), jer su to identični operatori. Na osnovu definicije se traže izvodi višeg reda:

$$\begin{aligned}
\frac{\Delta^2 F_n}{\Delta n^2} &= \frac{\Delta}{\Delta n}(F_{n+1} - F_n) = F_{n+2} - 2F_{n+1} + F_n; \\
\frac{\Delta^3 F_n}{\Delta n^3} &= F_{n+3} - 3F_{n+2} + 3F_{n+1} - F_n; \\
\frac{\Delta^m F_n}{\Delta n^m} &= \sum_{k=0}^{m} (-1)^k \binom{m}{k} F_{n+m-k}.
\end{aligned} \tag{2.2}$$

Osobine operacije diskretnog izvoda su:

$$\frac{\Delta}{\Delta n}(F_n + H_n) = \frac{\Delta F_n}{\Delta n} + \frac{\Delta H_n}{\Delta n};$$

$$\frac{\Delta}{\Delta n}(kF_n) = k\frac{\Delta}{\Delta n}F_n;$$

$$\begin{aligned}
\frac{\Delta}{\Delta n}(F_n H_n) &= F_{n+1}H_{n+1} - F_n H_n \pm F_{n+1}H_n = \\
&= \frac{\Delta F_n}{\Delta n}H_n + F_{n+1}\frac{\Delta H_n}{\Delta n} \pm F_n\frac{\Delta H_n}{\Delta n} = \\
&= \frac{\Delta F_n}{\Delta n}H_n + F_n\frac{\Delta H_n}{\Delta n} + \frac{\Delta F_n}{\Delta n}\frac{\Delta H_n}{\Delta n};
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\Delta^2}{\Delta n^2}(F_n H_n) &= \frac{\Delta^2 F_n}{\Delta n^2}H_n + \frac{\Delta^2 H_n}{\Delta n^2}F_n + \\
&+ 2\frac{\Delta^2 F_n}{\Delta n^2}\frac{\Delta H_n}{\Delta n} + 2\frac{\Delta^2 H_n}{\Delta n^2}\frac{\Delta F_n}{\Delta n} + \\
&+ 2\frac{\Delta F_n}{\Delta n}\frac{\Delta H_n}{\Delta n} + \frac{\Delta^2 F_n}{\Delta n^2}\frac{\Delta^2 H_n}{\Delta n^2};
\end{aligned} \tag{2.3}$$

$$\begin{aligned}\frac{\Delta}{\Delta n}\left(\frac{F_n}{H_n}\right) &= \frac{F_{n+1}}{H_{n+1}} - \frac{F_n}{H_n} = \\ &= \frac{F_{n+1}H_n - F_nH_{n+1} \pm F_nH_n}{H_{n+1}H_n} = \\ &= \frac{\frac{\Delta F_n}{\Delta n}H_n - F_n\frac{\Delta H_n}{\Delta n}}{H_{n+1}H_n};\end{aligned}$$

$$\frac{\Delta}{\Delta n}F_{\varphi_n} = \frac{\Delta F_{\varphi_n}}{\Delta\varphi_n}\frac{\Delta\varphi_n}{\Delta n}.$$

Moguće je uzeti da priraštaj promenljive bude veći od jedan (npr. $\Delta_h n = h$). Tada bi definicija diskretnog izvoda, tj. diferencije funkcije bila:

$$\Delta_h F_n \stackrel{\text{def}}{=} F_{n+h} - F_n. \tag{2.4}$$

Ovim prethodna analiza ne gubi na opštosti, jer se takve diferencije svode na jedinične preko obrasca:

$$\Delta_h = (\Delta + 1)^h - 1. \tag{2.5}$$

Diskretni izvod (tj. diferencija) funkcije može se definisati preko translacionog operatora $\hat{T}_k$, na sledeći način:

$$\hat{T}_k F_n \stackrel{\text{def}}{=} F_{n+k}; \tag{2.6}$$

odakle sledi:

$$\begin{aligned}&\frac{\Delta F_n}{\Delta n} = (\hat{T}_1 - 1)F_n;\\ &\frac{\Delta^m F_n}{\Delta n^m} = (\hat{T}_1 - 1)^m F_n = \sum_{k=0}^{m}(-1)^k\binom{m}{k}\hat{T}_{m-k}F_n.\end{aligned} \tag{2.7}$$

Osobine translacionog operatora su:

$$(\hat{T}_k)^n = \hat{T}_{nk}; \qquad \hat{T}_k^{-1} = \hat{T}_{-k}; \qquad \hat{T}_k C = C\hat{T}_k; \qquad \hat{T}_k(F_n + G_n) = \hat{T}_k F_n + \hat{T}_k G_n. \tag{2.8}$$

Linearnost translacionog operatora sledi iz linearnosti diskretnog izvoda. Vrlo važno je imati u vidu da translacioni operator ne komutira sa multiplikativnim operatorom $\hat{f}_n$ kada ovaj zavisi od iste diskretne promenljive:

$$(\hat{T}_k\hat{f}_n)F_n \neq (\hat{f}_n\hat{T}_k)F_n, \qquad \text{jer:} \quad (\hat{T}_k\hat{f}_n)F_n = f_{n+k}F_{n+k}, \quad \text{dok je:} \quad (\hat{f}_n\hat{T}_k)F_n = f_nF_{n+k}.$$

Diskretna integracija je inverzna operacija diskretnom diferenciranju. Translacioni operator je koristan upravo zbog definisanja diskretne integracije:

$$\frac{\Delta^{-1}}{\Delta n}F_n \stackrel{\text{def}}{=} (\hat{T}_1 - 1)^{-1}F_n. \tag{2.9}$$

Sada treba naći eksplicitni oblik ovog inverznog operatora. On će imati dve forme, koje slede iz činjenice da se osnovni operator $(\hat{T}_k - 1)$ može napisati na dva načina, u zavisnosti od toga koji sabirak faktorišemo ispred zagrade:

$$(\hat{T}_1 - 1) = \begin{cases} \hat{T}_1(1 - \hat{T}_{-1}); \\ -(1 - \hat{T}_1). \end{cases} \tag{2.10}$$

Na osnovu ovoga, a po pravilu za razvoj geometrijske progresije, inverzni operator je dat sa:

$$(\hat{T}_1 - 1)^{-1} = \begin{cases} (1 - \hat{T}_{-1})^{-1}\hat{T}_{-1} = \sum\limits_{k=0}^{\infty} \hat{T}_{-k-1}; \\ -(1 - \hat{T}_1)^{-1} = -\sum\limits_{k=0}^{\infty} \hat{T}_k. \end{cases} \tag{2.11}$$

S obzirom na dobijenu formulu, diskretni integral funkcije F_n će se računati po obrascu:

$$\frac{\Delta^{-1}}{\Delta n} F_n = \begin{cases} \sum\limits_{k=0}^{\infty} \hat{T}_{-k-1} F_n = F_{n-1} + F_{n-2} + F_{n-3} + \dots \\ -\sum\limits_{k=0}^{\infty} \hat{T}_k F_n = -F_n - F_{n+1} - F_{n+2} - \dots \end{cases}$$

U sledećoj tabeli dat je pregled nekoliko diskretnih izvoda i integrala tipičnih funkcija.[1]

[1]Kao što je u diferencijalnom računu skup elementarnih funkcija proširen za funkciju $\ln x$, da bi imali primitivnu funkciju, od funkcije $1/x$, tako se i u diferencnom računu uvodi Psi funkcija sa osobinom $\Delta\Psi_n = 1/n$. Njena definicija je:

$$\Psi_n \overset{def}{=} (\ln \Gamma_n)' = \frac{\Gamma'_n}{\Gamma_n}$$

F_n	$\dfrac{\Delta}{\Delta n}$	$\dfrac{\Delta^{-1}}{\Delta n}$
1	0	n
n	1	$\dfrac{n(n-1)}{2}$
n^2	n^2+n+1	$\dfrac{n^3}{3}-\dfrac{n^2}{2}+\dfrac{n}{6}$
n^3	n^3+3n^2+2n+1	$\dfrac{n^4}{4}-\dfrac{n^3}{2}+\dfrac{n^2}{4}$
$n^\alpha, (\alpha \geq 1)$	$(n+1)^\alpha - n$	$\sum\limits_{k=0}^{n-1}(n-k)^\alpha$
$(-1)^n$	$2(-1)^{n+1}$	$\frac{1}{2}(-1)^{n+1}$
$A^{\alpha n}, (A \geq 1, \alpha \geq 0)$	$A^{\alpha n}(A^\alpha - 1)$	$\dfrac{A^{\alpha n}}{A^\alpha - 1}$
$n(-1)^n$	$(-1)^{n+1}(1+2n)$	$\dfrac{1}{2}(-1)^{n+1}(n-\dfrac{1}{2})$
$nA^n, A \geq 1$	$(A-1)nA^n + A^{n+1}$	$\dfrac{A^n}{A-1}(n-\dfrac{A}{A-1})$
$A\,\mathrm{e}^{-\alpha n}, (A \geq 1, \alpha \geq 0)$	$A\,\mathrm{e}^{-\alpha n}(\mathrm{e}^{-\alpha} - 1)$	$-\dfrac{A\,\mathrm{e}^{-\alpha(n-1)}}{\mathrm{e}^\alpha - 1}$
2^n	2^n	2^n
$\log_A n$	$\log_A \dfrac{n+1}{n}$	$\log_A (n-1)!$
$\sin(\alpha n + b)$	$2\sin\frac{\alpha}{2}\cos(\alpha n + \frac{\alpha}{2} + b)$	$-\dfrac{\cos(\alpha n + b - \frac{\alpha}{2})}{2\sin\frac{\alpha}{2}}$
$\cos(\alpha n + b)$	$-2\sin\frac{\alpha}{2}\sin(\alpha n + \frac{\alpha}{2} + b)$	$\dfrac{\sin(\alpha n + b - \frac{\alpha}{2})}{2\sin\frac{\alpha}{2}}$
$\mathrm{sh}\,\alpha n$	$\dfrac{1}{2}\dfrac{(\mathrm{e}^\alpha - 1)(\mathrm{e}^\alpha \mathrm{e}^{2\alpha n} + 1)}{\mathrm{e}^\alpha \mathrm{e}^{\alpha n}}$	$\dfrac{1}{2}\dfrac{\mathrm{e}^{\alpha n} + \mathrm{e}^{-\alpha(n-1)}}{\mathrm{e}^\alpha - 1}$
$\mathrm{ch}\,\alpha n$	$\dfrac{1}{2}\dfrac{(\mathrm{e}^\alpha - 1)(\mathrm{e}^\alpha \mathrm{e}^{2\alpha n} - 1)}{\mathrm{e}^\alpha \mathrm{e}^{\alpha n}}$	$\dfrac{1}{2}\dfrac{\mathrm{e}^{\alpha n} - \mathrm{e}^{-\alpha(n-1)}}{\mathrm{e}^\alpha - 1}$
$\dfrac{1}{n}$	$-\dfrac{1}{n(n+1)}$	Ψ_n
$\dfrac{1}{n^2}$	$-\dfrac{2n+1}{n^2(n+1)^2}$	Ψ'_n
$\dfrac{1}{n^\alpha}, (\alpha \geq 1)$	$\dfrac{1}{(n+1)^\alpha} - \dfrac{1}{n^\alpha}$	$-\sum\limits_{k=0}^{\infty}(n+k)^{-\alpha}$

3 Operatorsko rešavanje diferencnih jednačina

3.1 Diferencne jednačine I reda

Rešenja diferencnih jednačina I reda biće data samo kao pregled, dakle bez navođenja dokaza.

- Homogena diferencna jednačina:
  $\frac{\Delta}{\Delta n} Y_n + a_n Y_n = 0 \quad \text{ili} \quad Y_{n=1} + a_n Y_n = 0$
  ima rešenje:

$$Y_n = Y_0 \prod_{k=0}^{n-1} (1 - a_k). \tag{3.1}$$

- Linearna nehomogena jednačina:
  $\frac{\Delta}{\Delta n} Y_n + a_n Y_n = b_n \quad \text{ili} \quad Y_{n+1} + a_n Y_n = b_n,$
  ima sledeća rešenja:
  - neposrednom antidiferencijacijom:

$$Y_n = \begin{cases} \sum\limits_{k=0}^{\infty} (-1)^k (a_n^{-1}(\hat{T}_1 - 1))^k a_n^{-1} b_n; \\ \sum\limits_{k=0}^{\infty} (-1)^k ((\hat{T}_1 - 1)^{-1} a_n)^k (\hat{T}_1 - 1)^{-1} b_n, \end{cases} \tag{3.2}$$

  - smenom funkcije:

$$Y_n = C \prod_{k+0}^{n-1} (1 - a_k) + \prod_{k=0}^{n-1} (1 - a_k) \frac{\Delta^{-1}}{\Delta n} \left[\frac{b_n}{1 - a_n} \frac{1}{\prod\limits_{k=0}^{n-1} (1 - a_k)} \right]. \tag{3.3}$$

3.2 Diferencne jednačine II reda

Neke nepotpune diferencne jednačine II reda mogu se svesti na jednačine I reda pogodnom smenom. U tu grupu spadaju:

- jednačina u kojoj ne figuriše funkcija diskretne promenljive, nego samo njeni izvodi

$$\Phi \left(n, \frac{\Delta Y_n}{\Delta n}, \frac{\Delta^2 Y_n}{\Delta n^2} \right) = 0 \longrightarrow \Phi \left(n, p_n, \frac{\Delta p_n}{\Delta n} \right) = 0, \tag{3.4}$$

$$p_n = \frac{\Delta Y_n}{\Delta n}; \quad \frac{\Delta p_n}{\Delta n} = \frac{\Delta^2 Y_n}{\Delta n^2},$$

- jednačina u kojoj ne figuriše diskretna promenljiva nego samo tražena funkcija i njeni izvodi

$$\Phi(Y_n, \frac{\Delta Y_n}{\Delta n}, \frac{\Delta^2 Y_n}{\Delta n^2}) = 0 \longrightarrow \Phi(Y, p_Y, p_Y \frac{\Delta p_Y}{\Delta Y}) = 0, \tag{3.5}$$
$$p_Y = \frac{\Delta Y_n}{\Delta n}; \quad p_Y \frac{\Delta p_Y}{\Delta Y} = \frac{\Delta^2 Y_n}{\Delta n^2}.$$

Evo i pregleda linearnih diferencnih jednačina II reda.

- Homogena linearna diferencna jednačina sa konstantnim koeficijentima:

$$\frac{\Delta^2}{\Delta n^2} Y_n + a_1 \frac{\Delta}{\Delta n} Y_n + a_2 Y_n = 0 \quad \text{ili} \quad Y_{n+2} + a_1 Y_{n+1} + a_2 Y_n = 0. \tag{3.6}$$

  Smenom funkcije: $Y_n = x^n$, dobijaju se njena dva partikularna rešenja:

$$Y_n^{(1/2)} = \left(1 - \frac{a_1}{2} \pm \sqrt{\frac{a_1^2}{4} - a_1 - a_2}\right)^n. \tag{3.7}$$

- Ojlerova diferencna jednačina:

$$\frac{\Delta^2}{\Delta n^2} Y_n + \frac{A}{n} \frac{\Delta}{\Delta n} Y_n + \frac{B}{n^2} Y_n = 0 \quad \text{ili} \quad Y_{n+2} + \frac{A}{n} Y_{n+1} + \frac{B}{n^2} Y_n = 0. \tag{3.8}$$

  Smenom argumenta $n = \varphi_m$, uz uslov $A + B = 0$, dobijaju se njena dva partikularna rešenja:

$$Y_n^{(1)} = n; \quad Y_n^{(2)} = \frac{1}{3} n^2 (n^2 - 1). \tag{3.9}$$

Posmatrajmo sada linearnu homogenu diferencnu jednačinu drugog reda sa promenljivim koeficijentom:

$$\frac{\Delta^2 Y_n}{\Delta n^2} + \hat{f}_n Y_n = 0, \tag{3.10}$$

koja se može napisati u obliku:

$$\left((\hat{T}_1 - 1)^2 + \hat{f}_n\right) Y_n = 0. \tag{3.11}$$

Radi nalaženja rešenja formiraćemo analognu nehomogenu jednačinu:

$$\left((\hat{T}_1 - 1)^2 + \hat{f}_n\right) y_n = \Phi_n, \tag{3.12}$$

čije formalno rešenje je:

$$y_n = \left((\hat{T}_1 - 1)^2 + \hat{f}_n\right)^{-1} \Phi_n.$$

Ukoliko ova jednačina ima dva linearno nezavisna partikularna rešenja $y_n^{(1)}$ i $y_n^{(2)}$, onda za njih mora da važi:

$$\left((\hat{T}_1-1)^2+\hat{f}_n\right)y_n^{(1)}=\Phi_n; \qquad \left((\hat{T}_1-1)^2+\hat{f}_n\right)y_n^{(2)}=\Phi_n.$$

Oduzimanje ove dve jednačine daje za rezultat:

$$\left((\hat{T}_1-1)^2+\hat{f}_n\right)(y_n^{(1)}-y_n^{(2)})=0. \tag{3.13}$$

Poređenjem (3.13) sa (3.11) zaključuje se da je rešenje homogene jednačine (3.10):

$$Y_n=y_n^{(1)}-y_n^{(2)}.$$

Dakle, da bi se rešila homogena jednačina (3.11), prethodno se moraju naći dva partikularna rešenja nehomogene jednačine (3.12). Oba ova rešenja će se dobiti razvijanjem inverznog operatora u geometrijski red, jer on ima dve nezavisne forme, u zavisnosti od toga koji sabirak faktorišemo:

$$(\hat{T}_1-1)^2+\hat{f}_n=\begin{cases}\hat{f}_n\left(1+\hat{f}_n^{-1}(\hat{T}_1-1)^2\right);\\ (\hat{T}_1-1)^2\left(1+(\hat{T}_1-1)^{-2}\hat{f}_n\right),\end{cases} \tag{3.14}$$

pa sledi:

$$\begin{aligned}\left((\hat{T}_1-1)^2+\hat{f}_n\right)^{-1}&=\begin{cases}\left(1+\hat{f}_n^{-1}(\hat{T}_1-1)^2\right)^{-1}\hat{f}_n^{-1}\\ \left(1+(\hat{T}_1-1)^{-2}\hat{f}_n\right)^{-1}(\hat{T}_1-1)^2\end{cases}=\\ &=\begin{cases}\sum\limits_{k=0}^{\infty}(-1)^k\left(\hat{f}_n^{-1}(\hat{T}_1-1)^2\right)^k\hat{f}_n^{-1};\\ \sum\limits_{k=0}^{\infty}(-1)^k\left((\hat{T}_1-1)^{-2}\hat{f}_n\right)^k(\hat{T}_1-1)^{-2}.\end{cases}\end{aligned} \tag{3.15}$$

Ako se uvedu oznake:

$$\begin{aligned}\hat{J}_1&=\sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k\left(\hat{f}_n^{-1}(\hat{T}_1-1)^2\right)^k\hat{f}_n^{-1}=\\ &=\left(1-\hat{f}_n^{-1}(\hat{T}_1-1)^2+\hat{f}_n^{-1}(\hat{T}_1-1)^2\hat{f}_n^{-1}(\hat{T}_1-1)^2-\ldots\right)\hat{f}_n^{-1};\end{aligned} \tag{3.16}$$

$$\begin{aligned}\hat{J}_2&=\sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k\left((\hat{T}_1-1)^{-2}\hat{f}_n\right)^k(\hat{T}_1-1)^{-2}=\\ &=\left(1-(\hat{T}_1-1)^{-2}\hat{f}_n+(\hat{T}_1-1)^{-2}\hat{f}_n(\hat{T}_1-1)^{-2}\hat{f}_n-\ldots\right)(\hat{T}_1-1)^{-2},\end{aligned} \tag{3.17}$$

tada se dva partikularna rešenja nehomogene jednačine (3.12), mogu pisati kao:

$$y_n^{(1)}=\hat{J}_1\Phi_n; \tag{3.18}$$

$$y_n^{(2)} = \hat{J}_2 \Phi_n. \tag{3.19}$$

U pisanju izraza za $\hat{J}_1$ i $\hat{J}_2$ treba biti posebno obazriv, jer operatori $\hat{f}_n$ i $\hat{T}_k$ ne komutiraju. Nadalje je neophodno konkretizovati funkciju Φ_n. Ona se bira tako da se jedan od dva reda, (3.18) ili (3.19) preseče. Neka je:

$$\Phi_n = \hat{f}_n,$$

tada na osnovu dejstva operatora translacije na konstantu (C =const.): $(\hat{T}_1 - 1)^2 C = 0$, i na osnovu jednačina (3.16) i (3.17), sledi:

$$\begin{aligned} y_n^{(1)} &= \hat{J}_1 \hat{f}_n = \Big(1 - \hat{f}_n^{-1}(\hat{T}_1 - 1)^2 + \hat{f}_n^{-1}(\hat{T}_1 - 1)^2 \hat{f}_n^{-1}(\hat{T}_1 - 1)^2 - \dots\Big)\, \hat{f}_n^{-1}\hat{f}_n = 1; \\ y_n^{(2)} &= \hat{J}_2 \hat{f}_n = \Big(1 - (\hat{T}_1 - 1)^{-2}\hat{f}_n + (\hat{T}_1 - 1)^{-2}\hat{f}_n(\hat{T}_1 - 1)^{-2}\hat{f}_n - \dots\Big)\, (\hat{T}_1 - 1)^{-2}\hat{f}_n = \\ &= (\hat{T}_1 - 1)^{-2}\hat{f}_n - (\hat{T}_1 - 1)^{-2}\hat{f}_n(\hat{T}_1 - 1)^{-2}\hat{f}_n + \dots, \end{aligned}$$

uzimajući u obzir (3.13), traženo rešenje je:

$$Y_n = 1 - (\hat{T}_1 - 1)^{-2}\hat{f}_n + (\hat{T}_1 - 1)^{-2}\hat{f}_n(\hat{T}_1 - 1)^{-2}\hat{f}_n - \dots = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \Big((\hat{T}_1 - 1)^2 \hat{f}_n\Big)^k \tag{3.20}$$

Ovim je rešena homogena diferencna jednačina II reda (3.10), u najopštijem slučaju. Kada je funkcija $\hat{f}_n$ data, ostaje da se pronađe dejstvo gore navedenog operatora na nju. Za ovo je neophodno znati eksplicitnu formu operatora $(\hat{T}_1 - 1)^{-2}$. Ako primetimo sledeće:

$$\frac{1}{(1-x)^2} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\frac{1}{1-x} = \sum_{k=0}^{\infty}(k+1)x^k,$$

zbog dve mogućnosti faktorisanja:

$$(\hat{T}_1 - 1)^2 = \begin{cases} (\hat{T}_1 - 1)^2; \\ \hat{T}_1^2 (1 - \hat{T}_{-1})^2, \end{cases}$$

nezavisne forme operatora $(\hat{T}_1 - 1)^{-2}$, date su sa:

$$(\hat{T}_1 - 1)^{-2} = \begin{cases} (\hat{T}_1 - 1)^{-2} = \sum\limits_{k=0}^{\infty}(k+1)\hat{T}_k; \\ (1 - \hat{T}_{-1})^{-2}\hat{T}_{-2} = \sum\limits_{k=0}^{\infty}(k+1)\hat{T}_{-k-2}. \end{cases} \tag{3.21}$$

Radi dobijanja krajnjeg rešenja koristiće se ona forma koja daje konvergentan red.

Posmatrajmo jedan konkretan primer. Neka je $f_n = A\,\mathrm{e}^{\alpha n}$. Tada diferencna jednačina glasi:

$$\frac{\Delta^2 Y_n}{\Delta n^2} + A\,\mathrm{e}^{\alpha n}\, Y_n = 0. \tag{3.22}$$

Rešenje je dato relacijom (3.20). Ostaje još da se odlučimo za formu operatora $(\hat{T}_1 - 1)^{-2}$, jer će samo jedan od izraza iz (3.21) dati konvergentan red. Pokazuje se da je to onaj donji:

$$\begin{aligned}(\hat{T}_1 - 1)^{-2} A\,\mathrm{e}^{\alpha n} &= (\hat{T}_{-2} + 2\hat{T}_{-3} + 3\hat{T}_{-4} + \dots) A\,\mathrm{e}^{\alpha n} = \\ &= A\,\mathrm{e}^{\alpha n}\,\mathrm{e}^{-2\alpha}(1 + 2\,\mathrm{e}^{-\alpha} + 3\,\mathrm{e}^{-2\alpha} + \dots) = \\ &= A\,\mathrm{e}^{\alpha n}\,\mathrm{e}^{-2\alpha}(1 - \mathrm{e}^{-\alpha})^2 = \frac{A\,\mathrm{e}^{\alpha n}}{(\mathrm{e}^{\alpha} - 1)^2}\,.\end{aligned} \tag{3.23}$$

Sada se, prema (3.20) može napisati red za Y_n:

$$\begin{aligned}Y_n &= 1 - \frac{A\,\mathrm{e}^{\alpha n}}{(\mathrm{e}^{\alpha} - 1)^2} + \frac{A^2\,\mathrm{e}^{2\alpha n}}{(\mathrm{e}^{\alpha} - 1)^2(\mathrm{e}^{2\alpha} - 1)^2} - \frac{A^3\,\mathrm{e}^{3\alpha n}}{(\mathrm{e}^{\alpha} - 1)^2(\mathrm{e}^{2\alpha} - 1)^2(\mathrm{e}^{3\alpha} - 1)^2} + \dots = \\ &= \sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k \frac{(A\,\mathrm{e}^{\alpha n})^k}{\prod\limits_{s=1}^{k}(\mathrm{e}^{\alpha s} - 1)^2}\,,\end{aligned} \tag{3.24}$$

gde je po definiciji: $\prod\limits_{s=1}^{k}(\mathrm{e}^{\alpha s} - 1)^2 = 1$. Zamenom nađenog rešenja u polaznu jednačinu (3.22), može se dokazati da je ono korektno određeno.

3.3 Operatorsko rešavanje diferencne jednačine stanja kristalnih struktura

U fizičkim problemima istraživanja osobina i mogućih stanja elementarnih pobuđenja u nanostrukturnim kristalima, pojavljuje se diferencna jednačina tipa:

$$Y_{n+1} + Y_{n-1} + \rho_n Y_n = 0, \tag{3.25}$$

koja se preko translacionih operatora piše kao:

$$(\hat{T}_1 + \hat{T}_{-1} + \hat{\rho}_n) Y_n = 0. \tag{3.26}$$

Ukoliko je kristal translaciono invarijantan, funkcija ρ ne zavisi od indeksa n, pa se i jednačina svodi na onu sa konstantnim koeficijentom. U kristalima sa narušenom translacionom simetrijom funkcija ρ će zavisiti od indeksa n, koji označava položaj atoma u kristalu.

Rešenje (3.20) je upotrebljivo samo u slučaju kada jedan od operatora u jednačini primenjen na konstantu daje nulu kao rezultat, npr. $(\hat{T}_1 - 1)$. U jednačini (3.25) ni jedan od operatora primenjen na konstantu kao rezultat ne daje nulu. Zato je neophodno prvo transformisati polaznu jednačinu na sledeći način:

$$\Big((\hat{T}_1 + \hat{T}_{-1} - 2) + (\rho_n + 2)\Big) Y_n = 0. \tag{3.27}$$

Sada imamo odgovarajući oblik, jer $(\hat{T}_1 + \hat{T}_{-1} - 2)C = 0$. Uvedimo nove oznake:

$$\hat{a} \equiv \hat{T}_1 + \hat{T}_{-1} - 2, \qquad \hat{b}_n \equiv \rho_n + 2$$

Pri čemu je $\hat{a}C = 0$, $C =$const,a jednačina (3.27) prelazi u:

$$(\hat{a} + b_n)Y_n = 0. \tag{3.28}$$

Treba obratiti pažnju da operatori $\hat{a}$ i $\hat{b}_n$ ne komutiraju, tako da se mora voditi računa o redosledu pri pisanju izraza. Dalje rešavanje je identično onom u opštem slučaju. Dakle, tražimo razliku dva partikularna integrala analogne nehomogene diferencne jednačine, pri čemu dodatnu funkciju (nehomogeni deo) biramo tako da nam se rešenje maksimalno uprosti. Ali pre svega, treba naći forme inverznog operatora $(\hat{a} + \hat{b}_n)^{-1}$:

$$\hat{a} + \hat{b}_n = \begin{cases} \hat{b}_n(1 + \hat{b}_n^{-1}\hat{a}); \\ \hat{a}(1 + \hat{a}^{-1}\hat{b}_n), \end{cases}$$

odakle je:

$$(\hat{a} + \hat{b}_n)^{-1} = \begin{cases} \hat{J}_1 \equiv \sum\limits_{k=0}^{\infty}(-1)^k(\hat{b}_n^{-1}\hat{a})^k\hat{b}_n^{-1}; \\ \hat{J}_2 \equiv \sum\limits_{k=0}^{\infty}(-1)^k(\hat{a}^{-1}\hat{b}_n)^k\hat{a}^{-1}. \end{cases} \tag{3.29}$$

Ako za proizvoljnu funkciju uzmemo baš $\Phi_n = \hat{b}_n$, onda će partikularna rešenja biti:

$$\begin{aligned} y_n^{(1)} &= \hat{J}_1\Phi_n = (1 - \hat{b}_n^{-1}\hat{a} + \hat{b}_n^{-1}\hat{a}\hat{b}_n^{-1}\hat{a} - \dots)\hat{b}_n^{-1}\hat{b}_n = 1; \\ y_n^{(2)} &= \hat{J}_2\Phi_n = \hat{a}^{-1}\hat{b}_n - \hat{a}^{-1}\hat{b}_n\hat{a}^{-1}\hat{b}_n + \hat{a}^{-1}\hat{b}_n\hat{a}^{-1}\hat{b}_n\hat{a}^{-1}\hat{b}_n - \dots, \end{aligned} \tag{3.30}$$

a rešenje homogene jednačine će biti:

$$Y_n = y_n^{(1)} - y_n^{(2)} = 1 - \hat{a}^{-1}\hat{b}_n + \hat{a}^{-1}\hat{b}_n\hat{a}^{-1}\hat{b}_n - \dots = \sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k(\hat{a}^{-1}\hat{b}_n)^k. \tag{3.31}$$

Sada treba naći eksplicitnu formu operatora $\hat{a}^{-1}$. On se može napisati na dva načina:

$$\hat{a} = \begin{cases} -2\left(1 - \frac{1}{2}(\hat{T}_1 + \hat{T}_{-1})\right); \\ (\hat{T}_1 + \hat{T}_{-1})\left(1 - 2(\hat{T}_1 + \hat{T}_{-1})^{-1}\right), \end{cases}$$

pa je:

$$\hat{a}^{-1} = \begin{cases} -\frac{1}{2}\left(1 - \frac{1}{2}(\hat{T}_1 + \hat{T}_{-1})\right)^{-1} = -\sum\limits_{k=0}^{\infty}\frac{1}{2^{k+1}}(\hat{T}_1 + \hat{T}_{-1})^k; \\ \left(1 - 2(\hat{T}_1 + \hat{T}_{-1})^{-1}\right)^{-1}(\hat{T}_1 + \hat{T}_{-1})^{-1} = -\sum\limits_{k=0}^{\infty}2^k(\hat{T}_1 + \hat{T}_{-1})^{-k-1}. \end{cases} \tag{3.32}$$

I operator $\hat{T}_1 + \hat{T}_{-1}$ takođe se može napisati u dve forme:

$$\hat{T}_1 + \hat{T}_{-1} = \begin{cases} \hat{T}_1(1 + \hat{T}_{-2}); \\ \hat{T}_{-1}(1 + \hat{T}_2), \end{cases}$$

pa onda sledi:

$$(\hat{T}_1 + \hat{T}_{-1})^{-1} = \begin{cases} (1 + \hat{T}_{-2})^{-1}\hat{T}_{-1} = \sum\limits_{k=0}^{\infty} (-1)^k \hat{T}_{-2k-1}; \\ (1 + \hat{T}_2)^{-1}\hat{T}_1 = \sum\limits_{k=0}^{\infty} (-1)^k \hat{T}_{2k+1}. \end{cases} \tag{3.33}$$

Sve operatorske forme se biraju prema istom kriterijumu – da rezultat nakon njihove primene bude konvergentan red.

Uzmimo za primer jednačinu:

$$Y_{n+1} + Y_{n-1} + (A\,\mathrm{e}^{\alpha n} - 2)Y_n = 0, \tag{3.34}$$

koja se u operatorskom obliku može napisati kao:

$$\Big((\hat{T}_1 + \hat{T}_{-1} - 2) + A\,\mathrm{e}^{\alpha n}\Big)\, Y_n = 0.$$

Dakle, u ovom slučaju $\hat{b}_n = A\,\mathrm{e}^{\alpha n}$. Zbog činjenice da je $\hat{b}_n$ eksponencijalna funkcija, dejstvo operatora (3.33) ne moramo tražiti preko beskonačnog reda, jer je:

$$(\hat{T}_1 + \hat{T}_{-1})A\,\mathrm{e}^{\alpha n} = 2\,\mathrm{ch}\,\alpha A\,\mathrm{e}^{\alpha n}. \tag{3.35}$$

Funkcije $A\,\mathrm{e}^{\alpha n}$ su, očigledno, svojstvene funkcije navedenog operatora. Zato se njemu inverzni operator može naći prostim množenjem izraza (3.35) sa $(\hat{T}_1 + \hat{T}_{-1})^{-1}$ sa leve strane:

$$(\hat{T}_1 + \hat{T}_{-1})^{-1} A\,\mathrm{e}^{\alpha n} = \frac{1}{2\,\mathrm{ch}\,\alpha} A\,\mathrm{e}^{\alpha n}.$$

S obzirom da je $\mathrm{ch}\,\alpha > 1$, radi konvergencije moramo koristiti onaj oblik operatora $\hat{a}^{-1}$, u kojem figuriše $(\hat{T}_1 - \hat{T}_{-1})^{-1}$, a to je forma napisana kao donja u izrazu (3.32). Dejstvo ovog operatora je:

$$\begin{aligned} \hat{a}^{-1} A\,\mathrm{e}^{\alpha n} &= \sum_{k=0}^{\infty} 2^k (\hat{T}_1 + \hat{T}_{-1})^{-k-1} A\,\mathrm{e}^{\alpha n} = \\ &= A\,\mathrm{e}^{\alpha n} \sum_{k=0}^{\infty} 2^k \frac{1}{2^{k+1}\,\mathrm{ch}^{k+1}\,\alpha} = \frac{A\,\mathrm{e}^{\alpha n}}{2(\mathrm{ch}\,\alpha - 1)}. \end{aligned}$$

Prema (3.31) ostaje još da se nađe dejstvo $(\hat{a}^{-1}\hat{b}_n)^k$. Kako je:

$$\hat{a}^{-1}\hat{b}_n\hat{a}^{-1}\hat{b}_n = \hat{a}^{-1} A\,\mathrm{e}^{\alpha n} \frac{A\,\mathrm{e}^{\alpha n}}{2(\mathrm{ch}\,\alpha - 1)} = \frac{A^2\,\mathrm{e}^{2\alpha n}}{2^2(\mathrm{ch}\,\alpha - 1)(\mathrm{ch}\,2\alpha - 1)},$$

to je konačno rešenje jednačine (3.34), oblika:

$$\begin{aligned} Y_n &= 1 - A\,\mathrm{e}^{\alpha n} \frac{A\,\mathrm{e}^{\alpha n}}{2(\mathrm{ch}\,\alpha - 1)} + \frac{A^2\,\mathrm{e}^{2\alpha n}}{2^2(\mathrm{ch}\,\alpha - 1)(\mathrm{ch}\,2\alpha - 1)} - \cdots = \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \left(\frac{A\,\mathrm{e}^{\alpha n}}{2}\right)^k \frac{1}{\prod\limits_{s=1}^{k} (\mathrm{ch}\,\alpha s - 1)}. \end{aligned} \tag{3.36}$$

Valjanost rešenja se može dokazati zamenom u početnu jednačinu.

Na kraju navedimo još jedan primer, koji se prirodno nadovezuje na prethodni:

$$Y_{n+1} + Y_{n-1} + (2\cos\alpha n - 2)Y_n = 0. \tag{3.37}$$

Ovde je $\hat{b}_n = \mathrm{e}^{i\alpha n} + \mathrm{e}^{-i\alpha n} = 2\cos\alpha n$, dakle opet se radi o svojstvenim funkcijama translacionog operatora. U fizičkom smislu, $\hat{b}_n$ je stojeći talas, koji se javlja u ultrakratkom jednodimenzionom atomskom lancu. Ova jednačina u operatorskom obliku izgleda:

$$\Big((\hat{T}_1 + \hat{T}_{-1} - 2) + 2\cos\alpha n\Big)\, Y_n = 0, \qquad \text{ili:} \qquad (\hat{a} + \hat{b}_n)Y_n = 0. \tag{3.38}$$

Prosto preslikavanje postupka rešavanja prethodnog problema nije moguće, jer u koraku $(\hat{a}^{-1}\hat{b}_n)^k$ dolazi do nagomilavanja izraza. Zato ćemo pribegnuti triku, jer ispostavlja se da je rešenje ove jednačine identično rešenju jedne prostije. Pođimo od jednačine:

$$(\hat{a} + \mathrm{e}^{i\alpha n})Y_n = 0, \tag{3.39}$$

i pomnožimo ovaj izraz sa leva sa $\mathrm{e}^{-2i\alpha n}$:

$$\left(\mathrm{e}^{-2i\alpha n}\,\hat{a} + \mathrm{e}^{-i\alpha n}\right) Y_n = 0. \tag{3.40}$$

Saberimo sada dva poslednja izraza:

$$\left((1 + \mathrm{e}^{-2i\alpha n})\hat{a} + \mathrm{e}^{i\alpha n} + \mathrm{e}^{-i\alpha n}\right) Y_n = 0.$$

Definišimo operator $\hat{\alpha}_n = (1 + \mathrm{e}^{-2i\alpha n})\hat{a}$, pa se ovaj izraz može zapisati kao:

$$(\hat{\alpha}_n + \hat{b}_n)Y_n = 0. \tag{3.41}$$

Srećna okolnost je ta, što operatori $\hat{\alpha}_n$ i $\hat{a}$ tako dejstvuju da važi:

$$\hat{\alpha}_n^{-1}\hat{b}_n = \hat{a}^{-1}\,\mathrm{e}^{i\alpha n} \equiv \left(1 + \mathrm{e}^{-2i\alpha n}\right)\hat{a}^{-1}\,\mathrm{e}^{i\alpha n}, \tag{3.42}$$

pa iz toga proizilazi da se rešenje početne jednačine (3.38) može naći iz rešenja mnogo prostije (3.39), a evo i dokaza prethodnog izraza:

$$\left(\hat{T}_1 + \hat{T}_{-1}\right)\mathrm{e}^{i\alpha n} = 2\cos\alpha\,\mathrm{e}^{i\alpha n}\,.$$

Za eksplicitni oblik operatora $\hat{a}^{-1}$ ovaj put, uzima se gornji izraz u (3.32), pa će biti:

$$\hat{a}^{-1}\,\mathrm{e}^{i\alpha n} = -\sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{2^{k+1}}2^k\cos^k\alpha\,\mathrm{e}^{i\alpha n} = -\frac{\mathrm{e}^{i\alpha n}}{2(1-\cos\alpha)}. \tag{3.43}$$

Isto tako se dobija:

$$\hat{a}^{-1}\,\mathrm{e}^{-i\alpha n} = -\frac{\mathrm{e}^{-i\alpha n}}{2(1-\cos\alpha)}\,, \tag{3.44}$$

a kada saberemo (3.43) i (3.44) dobićemo:

$$\hat{a}^{-1}\hat{b}_n = -\frac{\mathrm{e}^{i\alpha n}}{2(1-\cos\alpha)}\,. \tag{3.45}$$

Ako sada obe strane sa leva pomnožimo sa $(1+\mathrm{e}^{-2i\alpha n})^{-1}$, sledi:

$$\hat{\alpha}_n^{-1}\hat{b}_n = -\frac{\mathrm{e}^{i\alpha n}}{2(1-\cos\alpha)} \equiv \hat{a}^{-1}\,\mathrm{e}^{i\alpha n}\,. \tag{3.46}$$

Ovim je relacija (3.42) dokazana. Koristeći nju naći ćemo rešenje početne jednačine (3.38). Prema opštem obrascu za nalaženje rešenja (3.31), ostaje nam da nađemo sukcesivno dejstvo:

$$\begin{aligned}
(\hat{a}^{-1}\,\mathrm{e}^{i\alpha n})^2 &= -\frac{1}{2(1-\cos\alpha)}\hat{a}^{-1}\,\mathrm{e}^{2i\alpha n} = \frac{\mathrm{e}^{2i\alpha n}}{2^2(1-\cos\alpha)(1-\cos 2\alpha)}\,;\\
&\vdots \quad \vdots \quad \vdots\\
(\hat{a}^{-1}\,\mathrm{e}^{i\alpha n})^k &= \frac{(-1)^k\,\mathrm{e}^{i\alpha nk}}{2^k\prod\limits_{q=1}^{k}(1-\cos q\alpha)}\,,
\end{aligned} \tag{3.47}$$

odakle na osnovu (3.42), sledi:

$$\begin{aligned}
\hat{a}^{-k}(\mathrm{e}^{i\alpha n}+\mathrm{e}^{-i\alpha n}) &= (1+\mathrm{e}^{-2i\alpha n})^k \frac{(-1)^k\,\mathrm{e}^{i\alpha nk}}{2^k\prod\limits_{q=1}^{k}(1-\cos q\alpha)} = \\
&= \frac{(-1)^k(\mathrm{e}^{i\alpha n}+\mathrm{e}^{-i\alpha n})^k}{2^k\prod\limits_{q=1}^{k}(1-\cos q\alpha)}\,.
\end{aligned} \tag{3.48}$$

Konačno rešenje polazne jednačine (3.38), pomoću opšteg obrasca (3.31) je:

$$Y_n = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{(\mathrm{e}^{i\alpha n}+\mathrm{e}^{-i\alpha n})^k}{2^k\prod\limits_{q=1}^{k}(1-\cos q\alpha)} = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{\cos^k\alpha n}{\prod\limits_{q=1}^{k}(1-\cos q\alpha)}\,, \tag{3.49}$$

i oblika je superpozicije stojećih talasa koji se u ovakvoj strukturi (modelu) mogu javiti.

4 Mehaničke oscilacije u nanostrukturama

4.1 Sistem vezanih oscilatora

Mehaničko oscilovanje strukturnih jedinica (jona, atoma, molekula,...) u čvrstim telima je, kao posledica toplote, uvek prisutno kretanje za sve temperature veće od 0K. S obzirom na jako uzajamno dejstvo, poreklom od elastičnih sila, pomeraj jednog atoma stvara poremećaj u celoj kristalnoj rešetki. Taj poremećaj se širi u vidu mehaničkih talasa kroz nju. Zato, oscilovanje jednog atoma oko ravnotežnog položaja, ne može biti uzeto kao osnovna forma kretanja u čvrstom telu, nego će to biti njihovo kolektivno kretanje, tj. mehanički talasi.

Pristupimo klasičnom rešavanju problema sistema vezanih oscilatora pod dejstvom elastične sile, koje će nam dati nekoliko dragocenih podataka, od opšte važnosti. Zamislimo trodimenzionu rešetku od atoma mase M, na istom odstojanju a vezanih istim elastičnim silama. Ovo bi odgovaralo idealnoj prostoj kubnoj rešetki. Svi atomi usled toplote, osciluju u nekakvoj korelaciji. Koordinata ravnotežnog položaja proizvoljnog atoma je $\vec{n}$, a njegova elongacija $\vec{u}(\vec{n},t)$. Nadalje će se zavisnost od t podrazumevati. Potencijalna energija ovog sistema je:

$$U = \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} V(\vec{n}-\vec{m}+\vec{u}(\vec{n})-\vec{u}(\vec{m})). \tag{4.1}$$

Razvijmo ovo po malom parametru – razlici elongacija u okolini ravnotežnih položaja i ograničimo se na prva tri člana (tzv. harmonijska popravka, jer nam je najviši član harmonijski)

$$U = \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}}\Bigg\{V_0(\vec{n}-\vec{m}) + \sum_{\alpha}\Big[\frac{\partial V(\vec{n}-\vec{m})}{\partial(\vec{n}-\vec{m})_\alpha}\Big]_0[u_\alpha(\vec{n})-u_\alpha(\vec{m})]+ \\ + \frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta}\Big[\frac{\partial^2 V(\vec{n}-\vec{m})}{\partial(\vec{n}-\vec{m})_\alpha\partial(\vec{n}-\vec{m})_\beta}\Big]_0[u_\alpha(\vec{n})-u_\alpha(\vec{m})][u_\beta(\vec{n})-u_\beta(\vec{m})]+\dots\Bigg\}.$$

Prvi član ovog izraza je potencijalna energija veze u odsustvu termičkih oscilacija ili na $T=0$K. Istina je da na nultoj temperaturi ne zamire svo kretanje. Postoje tzv. nulte oscilacije kao posledica relacije neodređenosti, ali takvo kretanje nije termičko. Zato ćemo prvi član proglasiti referentnim nivoom i odbaciti. Drugi član razvoja će biti jednak nuli jer je ravnotežni položaj na minimumu potencijalne energije. Ako sada ovome dodamo kinetičku energiju ($\vec{p}_\alpha = M\dot{u}_\alpha$), dobićemo Hamiltonijan sistema vezanih oscilatora:

$$H = \sum_{\alpha\vec{n}}\frac{1}{2M}p_\alpha^2(\vec{n}) + \frac{1}{4}\sum_{\alpha\beta\vec{n}\vec{m}} C_{\alpha\beta}(\vec{n}-\vec{m})\big[u_\alpha(\vec{n})-u_\alpha(\vec{m})\big]\big[u_\beta(\vec{n})-u_\beta(\vec{m})\big], \tag{4.2}$$

gde uvedena oznaka $C_{\alpha\beta}(\vec{n}-\vec{m})$ ima smisao Hukovih konstanti elastičnosti. $C_{\alpha\alpha}$ su Hukove konstante istezanja u pravcima koordinatnih osa $\alpha = x,y,z$, a $C_{\alpha\beta,\alpha\neq\beta}$ su torzione konstante, pri čemu važi simetričnost koeficijenata $C_{\alpha\beta} = C_{\beta\alpha}$. Pretpostavimo da elastične sile koje drže čvorove na okupu vrlo brzo opadaju sa rastojanjem. Ovo je iskustveno opravdano, na primer, u molekulskim i kovalentnim kristalima rešetku održava Lenard-Džonsov potencijal proporcionalan sa r^{-6}. Tada interakcioni deo Hamiltonijana smemo napisati u aproksimaciji najbližih suseda. To izvodimo tako što sumiranje po indeksu $\vec{m}$ zamenjujemo sumiranjem po indeksu $\vec{\lambda}$ koji označava rastojanje atoma $\vec{n}$ od njegovog najbližeg suseda. S obzirom na idealnost kristala, $\vec{\lambda}$ ima istu vrednost za sve susede, odakle sledi da ne moramo vući zavisnost Hukovih konstanti od rastojanja, jer operišemo sa jednim istim rastojanjem. Hamiltonijan postaje:

$$H = \sum_{\alpha\vec{n}} \frac{M}{2} \dot{u}_\alpha^2(\vec{n}) + \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\vec{n}\vec{\lambda}} C_{\alpha\beta} \big[u_\alpha(\vec{n}) - u_\alpha(\vec{n} \pm \vec{\lambda})\big] \big[u_\beta(\vec{n}) - u_\beta(\vec{n} \pm \vec{\lambda})\big]. \tag{4.3}$$

Prvo ispitajmo dinamičko ponašanje ovog sistema klasičnim zakonom kretanja:

$$M\ddot{u}_\alpha(\vec{n}) = -\frac{\partial H_{int}}{\partial u_\alpha(\vec{n})},$$

odakle dobijamo:

$$M\ddot{u}_\alpha(\vec{n}) = \frac{1}{2} \sum_{\beta\vec{\lambda}} C_{\alpha\beta} \big[u_\beta(\vec{n} \pm \vec{\lambda}) + u_\beta(\vec{n} \mp \vec{\lambda}) - 2u_\beta(\vec{n})\big]. \tag{4.4}$$

Jedno partikularno rešenje ovog sistema jednačina je upravo skup funkcija ravnih talasa, što je dokaz o načinu širenja poremećaja kroz sistem vezanih oscilatora:

$$u_\alpha(\vec{n}) = A_\alpha(\vec{k})\, \mathrm{e}^{\vec{k}\vec{n} - it\omega(\vec{k})}\,. \tag{4.5}$$

Ako ovo rešenje zamenimo u prethodnu jednačinu, dobićemo linearni homogeni sistem za nepoznate komponente amplituda ravnih talasa:

$$\sum_{\beta=1}^{3} \Big(\omega^2(\vec{k})\delta_{\alpha\beta} - f(\vec{k})C_{\alpha\beta}\Big)\, A_\beta(\vec{k}) = 0, \qquad f(\vec{k}) = \frac{2}{M} \sum_{\vec{\lambda}} \sin^2 \frac{\vec{k}\vec{\lambda}}{2}. \tag{4.6}$$

Ovaj sistem će imati netrivijalna rešenja samo kada je:

$$\det \|\omega^2(\vec{k})\delta_{\alpha\beta} - f(\vec{k})C_{\alpha\beta}\| = 0. \tag{4.7}$$

Iz ovoga se može izvući nekoliko važnih podataka.

1. Postoje tri rešenja za frekvencije mehaničkih talasa $\omega_j(\vec{k})$. To znači da možemo konstruisati koordinatni sistem sa ortovima $\vec{\ell}_i(\vec{k})\ell_j(\vec{k}) = \delta_{ij}$ u kome se talasi ovim frekvencijama prostiru duž koordinatnih osa. Ako se pri tome uzme da je jedan od ortova $\vec{\ell}\|\vec{k}$, onda on odgovara pravcu prostiranja longitudinalnih talasa, a ostala dva orta pravcima prostiranja transverzalnih mehaničkih talasa. Ovi ortovi se nazivaju polarizacioni fononski vektori.

2. Dobijene frekvencije ne zavise samo od mase oscilatora (atoma) M i Hukovih konstanti $C_{\alpha\beta}$, kao kod izolovanog oscilatora, nego, preko funkcije $f(\vec{k})$ i od talasnog vektora. Ovo je, generalno, odlika talasnog kretanja kao kolektivnog fenomena. To znači da frekvencije talasa zavise od njihovog pravca prostiranja. Ovaj fenomen se naziva disperzija i posledica je, ne neke interakcije, nego geometrije sredine kroz koju se talas širi.

3. Ako uzmemo da je $\lambda_i = a$, što bi odgovaralo prostoj kubnoj rešetki sa kojom ćemo raditi i ako je $|\vec{k}|$ dovoljno malo, funkcija $f(\vec{k})$ se može aproksimirati sa:

$$f(\vec{k}) = \frac{a^2k^2}{M}, \tag{4.8}$$

pa se zamenom u (4.7) uz zanemarivanje torzionih koeficijenata jer su za red veličine manji od koeficijenata istezanja($C_{\alpha\beta} \ll C_{\alpha\alpha},\ \ \alpha \neq \beta$), dobija za frekvencije:

$$\omega_\alpha(\vec{k}) = kv_\alpha; \qquad v_\alpha = a\sqrt{\frac{C_{\alpha\alpha}}{M}}. \tag{4.9}$$

Ovde su v_α brzine mehaničkih talasa, za koje se može uzeti da odgovaraju brzini zvuka. Vidi se da frekvencije ovih zvučnih talasa teže nuli kada k teži nuli.

4.2 Fononski model

Pređimo sada na modernije opisivanje ovih pojava. Za tu svrhu uvodimo kvantnu transformaciju fizičkih veličina koja je uslovljena time da dobijeni Hamiltonijan bude kvantni linearni harmonijski oscilator, odnosno da bude dijagonalan. Upotrebimo modifikaciju rešenja klasičnog zakona kretanja (4.5). Koordinata i impuls postaju operatori:

$$\begin{aligned} \hat{\vec{u}}_{\vec{n}} &= \sum_{\vec{k}j} \vec{\ell}_j(\vec{k})\sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_j(\vec{k})}}\left[\hat{b}_j(\vec{k})\,\mathrm{e}^{i\vec{k}\vec{n}-it\omega_j(\vec{k})} + \hat{b}_j^+(\vec{k})\,\mathrm{e}^{-i\vec{k}\vec{n}+it\omega_j(\vec{k})}\right]; \\ \hat{\vec{p}}_{\vec{n}} &= \frac{1}{i}\sum_{\vec{k}j} \vec{\ell}_j(\vec{k})\sqrt{\frac{\hbar M\omega_j(\vec{k})}{2N}}\left[\hat{b}_j(\vec{k})\,\mathrm{e}^{i\vec{k}\vec{n}-it\omega_j(\vec{k})} + \hat{b}_j^+(\vec{k})\,\mathrm{e}^{-i\vec{k}\vec{n}+it\omega_j(\vec{k})}\right], \end{aligned} \tag{4.10}$$

koji zadovoljavaju komutacione relacije:

$$[u_{\alpha\vec{n}}, p_{\beta\vec{m}}] = i\hbar\delta_{\vec{n},\vec{m}}\delta_{\alpha,\beta}; \qquad [u_{\alpha\vec{n}}, u_{\beta\vec{m}}] = [p_{\alpha\vec{n}}, p_{\beta\vec{m}}] = 0. \tag{4.11}$$

Konjugovani član u (4.10) je neophodan da bi se očuvala ermitivnost operatora, $\vec{\ell}_j(\vec{k})$ su fononski polarizacioni vektori. Zamenom (4.10) u (4.2) dobija se:

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}j}\left(\hat{n}_j(\vec{k}) + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_j(\vec{k}); \qquad \hat{n}_j(\vec{k}) = b_j^+(\vec{k})b_j(\vec{k}).$$

Ovim smo sistem spregnutih oscilatora, sveli na zbir pojedinačnih kvantnih linearnih harmonijskih oscilatora, a rešavanje termodinamičkih osobina čvrstih tela na prebrojavanje izvesnih kvazičestica, tj. kvanata pobuđenja harmonijskog oscilatora – fonona. Fonon definišemo kao kvazičesticu koja opisuje osnovno, nerazložljivo termičko kretanje u čvrstom telu, a koje u sebi uključuje sve atome. Iz (4.10) se vidi da su fononi uvedeni kao bozonske čestice. Za to postoji razlog. Ako bi u izrazima zamenili bozonske, fermi operatorima, dobili bi da energija sistema ne zavisi od broja pobuđenja u njemu, tj. njena srednja vrednost od temperature, što protivreči iskustvu. U kristalima sa prostom kubnom rešetkom, i za male vrednosti talasnog vektora $\vec{k}$, fononi imaju linearan zakon disperzije:

$$E_j(\vec{k}) = \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{n}_j(\vec{k})} = \hbar\omega_j(\vec{k}) \equiv \hbar k v_j \equiv p v_j. \tag{4.12}$$

Fononi sa ovim zakonom disperzije nazivaju se akustički fononi.

Pri analizi kristala složene strukture, sa σ atoma u elementarnoj ćeliji, postoji 3σ rešenja za frekvencije $\omega_j(\vec{k})$, od toga uvek 3 rešenja sa osobinom $\lim_{k\to 0}\omega(\vec{k}) = 0$, koja se odnose na akustičke fonone i $3\sigma - 3$ rešenja sa zakonom disperzije $\lim_{k\to 0}\omega(\vec{k}) \neq 0$, koji se nazivaju optički fononi. Važno je shvatiti da su zakoni disperzije posledica geometrije prostora u kome žive (kvazi)čestice, a ne neke interakcije. Na primer, slobodna čestica obitava u praznom prostoru koji je izotropan, i kao posledica toga njena energija zavisi samo od intenziteta impulsa. Fononi opstaju samo u kristalu (što ih i čini kvazičesticama), a taj „njihov prostor" nije izotropan, jer naseljenost atoma zavisi od pravca. Zbog ovoga generalno njihova energija će zavisiti od pravca talasnog vektora, a zbog pravilnosti rasporeda atoma ona će biti periodična funkcija impulsa (talasnog vektora). Ne treba zaboraviti da je gornja linearna zavisnost dobijena tek aproksimacijom sinusne funkcije za male vrednosti talasnog vektora. U opštem slučaju impuls čak i ne mora biti održan, fonon može predati rešetki deo svog impulsa u diskretnim vrednostima, zato je ispravnije reći da je to kvaziimpuls!

Sada se kristal može zamisliti kao „sud" koji sadrži fononski gas, a proučavanje dinamičkih osobina kristala se svodi na rešavanje dinamike ovoga gasa, za šta postoje razrađene metode. Ovo je, zapravo, svrha uvođenja svih kvazičestičnih modela. Sa temperaturom rastu amplitude oscilovanja atoma, a time i broj fonona. Ako sistem nije snažno pobuđen, broj fonona je dovoljno mali da možemo zanemariti njihovu međusobnu interakciju, pa imamo idealan kvantni gas. Ova situacija važi u relativno širokom pojasu temperatura, jer amplitude oscilovanja atoma u čvrstom telu slabo rastu sa temperaturom i ostaju male (u poređenju sa međuatomskim rastojanjem) čak i u bliskoj okolini agregatnog faznog prelaza. Tečno stanje nije rezultat „miksovanja" atoma, zbog velikih amplituda oscilovanja, nego je rezultat energetski optimalnije konfiguracije sistema na temperaturi prelaza. Tada je vrednost slobodne energije manja, ako sistem zauzme izotropnu konfiguraciju. Međutim, mnogo pre agregatnog prelaza, verovatno je da će se dogoditi neki strukturni fazni prelaz (II vrste), kada se gubi konfiguracija proste kubne rešetke. Dobra procena gornje temperaturne granice primenljivosti fononskog modela je sledeća:

- Neka je ω_D – Debajeva frekvencija, kojoj odgovara maksimalna vrednost talasnog vektora. S obzirom da su sve dozvoljene vrednosti $\vec{k}$ u I Briluenovoj zoni i da je struktura prosta kubna sa parametrom elementarne ćelije a, maksimalno $\vec{k}$ je:

$$k_D = \frac{\pi\sqrt{3}}{a}. \tag{4.13}$$

- Neka se mehanički talasi kroz kristal prostiru brzinom zvuka c. Tada će tzv. Debajeva temperatura biti:

$$T_D = \frac{\hbar\omega_D}{k_B} = \frac{\hbar c k_D}{k_B} = \frac{\pi\sqrt{3}\hbar c}{a k_B} \sim 10^2\ \text{K}. \tag{4.14}$$

Mada je s obzirom na mogućnost strukturnog prelaza, najbolje ograditi se i reći da je harmonijska aproksimacija, koja ne podrazumeva interakcije među fononima i svodi termodinamiku čvrstog tela na termodinamiku idealnog bozonskog gasa fonona, dobra u onom opsegu temperatura daleko od tačke faznog prelaza, bilo I ili II vrste.

Fononi, kao toplotna pobuđenja, su uvek prisutni podsistem, u čvrstom telu na temperaturi većoj od nulte i kao takvi utiču na ponašanje svih ostalih elementarnih pobuđenja koja se mogu pojaviti. Oni su osnovni činioci koji određuju osobine i ponašanje kristalnog sistema.

4.3 Fononski podsistem u tankim kristalnim filmovima

Kristalni film je struktura sa narušenom translacionom simetrijom u jednom pravcu. Ovde je analiziran ultratanki film, beskonačan (translatorno invarijantan) u $X0Y$ ravni, sa nanometarskom debljinom u pravcu z-ose. Osnovna posledica narušenja simetrije biće prostorna zavisnost fizičkih karakteristika filma, gde će sve fizičke veličine zavisiti od indeksa $n_z = 0, 1, \dots, N_z$, kojim se numerišu kristalografske ravni u z-pravcu. Ozbiljnost analize zavisi od uzetih graničnih uslova. Ovde će se uzeti u obzir najprostiji slučaj slobodnih površina, što znači da su Hukove konstante u prvoj i poslednjoj ravni iste kao i u unutrašnjim i da slojevi sa indeksima $n_z \leq -1$ i $n_z \geq N_z + 1$ ne postoje.

Analiza će biti izvršena tehnikom dvovremenskih temperaturskih retardovanih Grinovih funkcija. To je jedini zatvoreni postupak. To znači da njime rešavamo i kvantnomehanički deo problema (nalaženje zakona disperzije i vremena života kvazičestica) i to rešavanjem zakona kretanja Grinove funkcije. A onda, iz spektralne intenzivnosti Grinove funkcije dobijamo i srednje vrednosti proizvoda operatora, a to je statistički deo problema (npr. nalaženje koncentracija).

4.3.1 Grinova funkcija tipa pomeraj-pomeraj

Hamiltonijan idealne kristalne strukture, sa prostom kubnom rešetkom u aproksimaciji najbližih suseda je dat u (4.3). U razvijenom obliku, uz zanemarene torzione Hukove konstante on ima oblik:

$$\begin{aligned} H = & \sum_{\alpha\vec{n}} \frac{p^2_{\alpha\vec{n}}}{2M} + \sum_{\alpha n_x n_y n_z} \frac{C_\alpha}{4} \times \\ & \times \Big[(u_{\alpha,n_x+1,n_y,n_z} - u_{\alpha,n_x,n_y,n_z})^2 + (u_{\alpha,n_x-1,n_y,n_z} - u_{\alpha,n_x,n_y,n_z})^2 + \\ & + \ (u_{\alpha,n_x,n_y+1,n_z} - u_{\alpha,n_x,n_y,n_z})^2 + (u_{\alpha,n_x,n_y-1,n_z} - u_{\alpha,n_x,n_y,n_z})^2 + \\ & + \ (u_{\alpha,n_x,n_y,n_z+1} - u_{\alpha,n_x,n_y,n_z})^2 + (u_{\alpha,n_x,n_y,n_z-1} - u_{\alpha,n_x,n_y,n_z})^2 \Big], \end{aligned} \tag{4.15}$$

pri čemu operatori $u_{\alpha\vec{n}}$ i $p_{\alpha\vec{n}} = M\dot{u}_{\alpha\vec{n}}$ zadovoljavaju navedene standardne komutacione relacije (4.11). Grinova funkcija tipa pomeraj-pomeraj ovog idealnog sistema je:

$$G^\alpha_{\vec{n},\vec{m}}(t-t') \equiv \ll u_{\alpha,\vec{n}}(t) | u_{\alpha,\vec{m}}(t') \gg = \Theta(t-t') < [u_{\alpha,\vec{n}}(t), u_{\alpha,\vec{m}}(t')] >_0 \ .$$

Dvostrukim diferenciranjem ovog izraza, dobija se:

$$M \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2} \ G^\alpha_{\vec{n},\vec{m}}(t-t') = -i\hbar\delta_{\vec{n},\vec{m}}\delta(t-t') + \frac{\Theta(t-t')}{i\hbar} < [[p_{\alpha,\vec{n}}, H(t)], u_{\alpha\vec{m}}(t')] >_0 \ . \tag{4.16}$$

Svešćemo ovu diferencijalnu jednačinu na algebarsku putem Furije transformacije $t \to \omega$. U fizičkom smislu ovo znači prelazak sa prostornih pomeraja na energetske promene. Pri ovome ćemo uzeti da je $t' = 0$, što čini standardnu, dozvoljenu olakšicu. Dakle,

$$G^\alpha_{\vec{n},\vec{m}}(t) = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} d\omega \, \mathrm{e}^{-i\omega t} \, G^\alpha_{\vec{n},\vec{m}}(\omega); \qquad \delta(t-t') = \frac{1}{2\pi} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} d\omega \, \mathrm{e}^{-i\omega t}, \tag{4.17}$$

pa se nakon transformacije dobija:

$$-M\omega^2 G^{\alpha}_{\vec{n},\vec{m}}(\omega) = -\frac{i\hbar}{2\pi}\delta_{\vec{n},\vec{m}} + \frac{1}{i\hbar} \ll [p_{\alpha,\vec{n}}, H]|u_{\alpha,\vec{m}} \gg_{\omega}, \tag{4.18}$$

Pri čemu ω u indeksu označava koji će argument imati više Grinove funkcije. One se pojavljuju pri razvijanju komutatora:

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

Zamenom komutatora u prethodnu jednačinu, dobija se diferencna jednačina po diskretnom indeksu $\vec{n}$:

$$\begin{aligned}
&- M\omega^2 G^{\alpha}_{n_x,n_y,n_z,m_x,m_y,m_z} = -\frac{i\hbar}{2\pi}\delta_{n_x,m_x}\delta_{n_y,m_y}\delta_{n_z,m_z} - C_\alpha\big(6G^{\alpha}_{n_x,n_y,n_z,m_x,m_y,m_z} - \\
&- G^{\alpha}_{n_x+1,n_y,n_z,m_x,m_y,m_z} - G^{\alpha}_{n_x-1,n_y,n_z,m_x,m_y,m_z} - G^{\alpha}_{n_x,n_y+1,n_z,m_x,m_y,m_z} - \\
&- G^{\alpha}_{n_x,n_y-1,n_z,m_x,m_y,m_z} - G^{\alpha}_{n_x,n_y,n_z+1,m_x,m_y,m_z} - G^{\alpha}_{n_x,n_y,n_z-1,m_x,m_y,m_z}\big).
\end{aligned} \tag{4.19}$$

Kao što je kontinualna Furije transformacija (4.17) poslužila da se diferencijalna jednačina svede na algebarsku po drugom argumentu, tako će diskretna Furije transformacija poslužiti da se ova diferencna jednačina svede na algebarsku. U fizičkom smislu ova transformacija znači prelazak iz normalne u recipročnu rešetku ($\vec{n} \to \vec{k}$). Da je struktura idealna, tj. translatorno invarijantna u svim pravcima primenila bi se dakle:

$$G^{\alpha}_{\vec{n}\vec{m}} = \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}} \mathrm{e}^{-i(\vec{n}-\vec{m})\vec{k}}\, G^{\alpha}_{\vec{k}}(\omega); \qquad \delta_{\vec{n}\vec{m}} = \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}} \mathrm{e}^{-i(\vec{n}-\vec{m})\vec{k}} \tag{4.20}$$

i zamenom u prethodnu jednačinu dobio bi se sistem istih jednačina:

$$\left[\left(\frac{\omega}{\Omega_\alpha}\right)^2 + 2(\cos ak_x + \cos ak_y + \cos ak_z - 3)\right] G^{\alpha}_{\vec{k}}(\omega) = \frac{i\hbar}{2\pi C_\alpha}.$$

Odavde sledi eksplicitna forma funkcije Grina:

$$G^{\alpha}_{\vec{k}}(\omega) = \frac{i\hbar}{4\pi M\omega^{\alpha}_{\vec{k}}}\left(\frac{1}{\omega-\omega^{\alpha}_{\vec{k}}} - \frac{1}{\omega+\omega^{\alpha}_{\vec{k}}}\right). \tag{4.21}$$

Zakon disperzije za fonone sledi iz realnog dela polova Grinove funkcije, to jest:

$$E_\alpha(\vec{k}) = \hbar\omega^{\alpha}_{\vec{k}} = 2E_\alpha\sqrt{\sin^2\frac{ak_x}{2} + \sin^2\frac{ak_y}{2} + \sin^2\frac{ak_z}{2}}, \tag{4.22}$$

gde je $E_\alpha \equiv \hbar\Omega_\alpha = \hbar\sqrt{C_\alpha/M}$. Ovaj rezultat je već dobijen na osnovu klasičnog zakona kretanja u relaciji (4.7). U aproksimaciji malih talasnih vektora, mogu se zanemariti sinusne funkcije i tako dolazimo do poznate relacije za energije akustičkih fonona u idealnoj strukturi, prethodno dobijene klasičnim putem u relacijama (4.8), (4.9) i (4.12). Dalje, primetimo kako se Grinove funkcije po koordinatnim pravcima α, međusobno razlikuju samo onda kada Hukove konstante istezanja nisu iste. Ako uzmemo da je $C_1 = C_2 = C_3 \equiv C$, što je tačno za kubnu strukturu, više ne moramo vući indeks α, jer su sve 3 funkcije iste.

Međutim, struktura koja se proučava nije translatorno invarijantna u jednom pravcu. Zbog ovoga transformaciju (4.20) nije moguće primeniti bez modifikacije. Nju možemo nazvati nepotpuni diskretni Furije transform, jer se po indeksima n_x i n_y možemo rešiti diferencne jednačine, ali po n_z ne. Zbog toga uvodimo:

$$G_{\vec{n}\vec{m}}(\omega) = \frac{1}{N_xN_y}\sum_{k_xk_y} \mathrm{e}^{iak_x(n_x-m_x)+iak_y(n_y-m_y)}\, A_{n_z,m_z}(k_x,k_y,\omega); \tag{4.23}$$

$$\delta_{\vec{n}\vec{m}} = \frac{\delta_{n_zm_z}}{N_xN_y}\sum_{k_xk_y} \mathrm{e}^{iak_x(n_x-m_x)+iak_y(n_y-m_y)}.$$

Zamenjivanjem ovoga u izraz (4.19), dobija se diferencna jednačina samo po diskretnom argumentu n_z (nadalje će se radi preglednosti zavisnost A_{n_z,m_z} od k_x, k_y, ω podrazumevati):

$$A_{n_z+1,m_z} + A_{n_z-1,m_z} + \rho A_{n_z,m_z} = F_{n_zm_z}, \tag{4.24}$$

gde su:

$$\rho = \frac{M}{C}\omega^2 - 4\sin^2\frac{ak_x}{2} - 4\sin^2\frac{ak_y}{2} - 2; \qquad F_{n_z,m_z} = \frac{i\hbar}{2\pi}\frac{1}{C}\delta_{n_z,m_z}. \tag{4.25}$$

Dobijena je diferencna jednačina po amplitudama Grinove funkcije fonona, kristalne strukture, analizirana u poglavlju 3.3. Koeficijent ρ, zavisiće od n_z, samo onda kada Hukove konstante zavise od sloja. S obzirom na polaznu pretpostavku o slobodnim površinama, C ne zavisi od indeksa sloja, pa samim tim je i ρ konstantan koeficijent, što u velikoj meri olakšava dalje proračune. Sada primenimo granične uslove, pa kompletni sistem diferencnih jednačina ima oblik:

$$n_z = 0 : \qquad A_{1,m_z} + \rho A_{0,m_z} = F_{0,m_z} \tag{4.26}$$

$$1 \geq n_z \leq N_z : \qquad A_{n_z+1,m_z} + A_{n_z-1,m_z} + \rho A_{n_z,m_z} = F_{n_z,m_z} \tag{4.27}$$

$$n_z = N_z : \qquad A_{N_z,m_z} + \rho A_{N_z,m_z} = F_{N_z,m_z} \tag{4.28}$$

Kao posledica primene graničnih uslova, jednačina se raspada na sistem diferencnih jednačina II reda sa konstantnim koeficijentima. Rešenje ćemo tražiti u obliku linearne kombinacije sinusnih funkcija (koje su svojstvene funkcije operatora $\hat{T}_1 + \hat{T}_{-1}$):

$$A_{n_z,m_z} = \sum_{\mu=\mu_0}^{N_z'} a_{\mu,m_z}(\omega, k_x, k_y) \sin(n_z+1)\varphi_\mu, \tag{4.29}$$

gde su a_{μ,m_z} nepoznati koeficijenti koje treba odrediti. Zamenom rešenja (4.29) u jednačinu (4.27), dobija se:

$$\sum_{\mu=\mu_0}^{N_z'} a_{\mu,m_z} \left(2\cos\varphi_\mu + \rho\right) \sin(n_z+1)\varphi_\mu = \frac{i\hbar}{2\pi}\frac{1}{C}\delta_{n_z,m_z}, \tag{4.30}$$

a zamenom rešenja (4.29) u jednačinu (4.26):

$$\sum_{\mu=\mu_0}^{N_z'} a_{\mu,m_z} \left(2\cos\varphi_\mu + \rho\right) \sin\varphi_\mu = \frac{i\hbar}{2\pi}\frac{1}{C}\delta_{0,m_z}. \tag{4.31}$$

Poređenjem poslednja dva izraza zaključuje se da (4.31) sledi iz (4.30), ako se u njemu zameni vrednost $n_z = 0$. Dakle, rešenje jednačine (4.27) kao specijalan slučaj u sebi sadrži i rešenje jednačine (4.26).

Zamenimo sada rešenje (4.29) u jednačinu (4.28). Dobija se:

$$\sum_{\mu=\mu_0}^{N_z'} a_{\mu,m_z} \left(\sin N_z\varphi_\mu + \rho \sin(N_z+1)\varphi_\mu\right) = \frac{i\hbar}{2\pi}\frac{1}{C}\delta_{N_z,m_z}. \tag{4.32}$$

Cilj je da se i ova jednačina svede na specijalan slučaj jednačine (4.30) kada $n_z = N_z$, jer onda za ceo sistem važi jedinstveno rešenje (4.29). S obzirom na identitet:

$$\sin N_z\varphi_\mu + \rho\sin(N_z+1)\varphi_\mu = (2\cos\varphi_\mu + \rho)\sin(N_z+1)\varphi_\mu - \sin(N_z+2)\varphi_\mu,$$

vidimo da će naš zahtev biti ispunjen kada φ_μ zadovoljava:

$$\sin(N_z+2)\varphi_\mu = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \varphi_\mu = \frac{\pi\mu}{N_z+2}; \qquad \mu = 1, 2, \ldots, N_z+1. \tag{4.33}$$

Tada se i treća jednačina (4.28) svodi na specijalan slučaj druge (4.27) kada je $n_z = N_z$. Na ovome mestu treba istaći izomorfizam transformacije (4.29), jer se vidi da impulsni indeks μ, uzima isti broj vrednosti kao i prostorni indeks n_z. Posledica ovoga je da se fononi pojavljuju u svim slojevima. Da je transformacija holomorfna, njihova pojava bi odsustvovala u nekim slojevima, što je slučaj koji postoji kod drugih kvazičestica.

Zamenimo nađene dozvoljene vrednosti ugla φ_μ u pretpostavljeno rešenje (4.29):

$$A_{n_z,m_z} = \sum_{\mu=1}^{N_z+1} a_{\mu,m_z}(\omega, k_x, k_y) \sin(n_z+1)\frac{\pi\mu}{N_z+2}. \tag{4.34}$$

Sada je jasno zašto je načinjen ovakav izbor za pretpostavljeno rešenje, jer se vidi jaka analogija sa rešavanjem parcijalnih diferencijalnih jednačina (primetiti da funkcija A zavisi od dva diskretna argumenta, a samo po jednom se diskretno diferencira). Dakle, izbor je pao na sinusne funkcije zbog sledećih razloga.

1. To su svojstvene funkcije operatora $\hat{T}_1 + \hat{T}_{-1}$. A rešenje se traži kao razvoj po svojstvenim funkcijama, gde je $a_{\mu,m_z}(\omega, k_x, k_y)$ reprezentacija funkcije A_{n_z,m_z} u bazi svojstvenih funkcija. Kako je spektar operatora nedegenerisan, broj svojstvenih funkcija odgovara broju slojeva.
2. Svojstvene funkcije su ortogonalne, jer je operator ermitski.
3. Argument φ_μ je izabran tako da svojstvene funkcije zadovoljavaju iste granične uslove kao i nepoznata funkcija

Sve ovo garantuje najprostiji put do rešenja. Dakle, za sve vrednosti indeksa n_z važiće jedinstvena jednačina (4.27), odnosno (4.30), odnosno kada zamenimo dozvoljene vrednosti ugla φ_μ:

$$\sum_{\mu=1}^{N_z+1} a_{\mu,m_z}(2\cos\frac{\pi\mu}{N_z+2} + \rho)\sin(n_z+1)\frac{\pi\mu}{N_z+2} = \frac{i\hbar}{2\pi}\frac{1}{C}\delta_{n_z,m_z}. \tag{4.35}$$

Sada sledi poslednji i ključni potez, a to je napisati Kronekerov simbol tako da se nepoznato a_{μ,m_z} može odrediti. Kronekera možemo da napišemo u reprezentaciji stojećih talasa:

$$\delta_{n_z,m_z} = \frac{2}{N_z+2}\sum_{\mu=1}^{N_z+1} \sin(n_z+1)\frac{\pi\mu}{N_z+2}\sin(m_z+1)\frac{\pi\mu}{N_z+2}, \tag{4.36}$$

zahvaljujući ortogonalnosti sinusnih funkcija. Sa druge strane malo prilagodimo i oblik parametra a_{μ,m_z}:

$$a_{\mu,m_z} = \frac{2}{N_z+2}\alpha(k_x, k_y, \mu, \omega)\sin(m_z+1)\frac{\pi\mu}{N_Z+2} \tag{4.37}$$

i sada zamenimo (4.36) i (4.37) u jednačinu (4.35), nakon čega konačno dobijamo:

$$\alpha(k_x, k_y, \mu, \omega) = \frac{i\hbar}{2\pi}\frac{1}{C}\frac{1}{\rho + 2\cos\frac{\pi\mu}{N_z+2}}. \tag{4.38}$$

Iz (4.23), jasno je da su singulariteti od $\alpha(k_x,k_y,\mu,\omega)$, istovremeno i polovi Grinove funkcije, a ako u prethodnu jednačinu zamenimo ρ iz (4.25), ona postaje:

$$\alpha(k_x,k_y,\mu,\omega)=\frac{i\hbar}{2\pi}\frac{1}{M}\frac{1}{2\omega_{k_x,k_y,\mu}}\left(\frac{1}{\omega-\omega_{k_x,k_y,\mu}}-\frac{1}{\omega+\omega_{k_x,k_y,\mu}}\right). \tag{4.39}$$

Dakle, zakon disperzije fonona u tankom kristalnom filmu kubne strukture dobija se u obliku:

$$E_\mu(k_x,k_y)=\hbar\omega_{k_x,k_y,\mu}=2E\sqrt{\sin^2\frac{ak_x}{2}+\sin^2\frac{ak_y}{2}+\sin^2\frac{\pi\mu}{2(N_z+2)}} \tag{4.40}$$

dakle, kao i kod idealne strukture (4.22), zavisnost energije od impulsa fonona je periodična funkcija, ali novina je da u pravcu u kome nema translacione invarijantnosti ona zavisi od broja slojeva, kao i od indeksa sloja μ. Ovim je završena kvantno-mehanička analiza problema.

Tehnika Grinovih funkcija, takođe, rešava i kvantno-statistički deo problema, a to je nalaženje srednje vrednosti operatora pomoću spektralne intenzivnosti Grinove funkcije. Za početak, neophodan je eksplicitni oblik Grinove funkcije, s toga zamenimo (4.39), (4.37) i (4.29) u (4.23) i dobijamo:

$$\begin{aligned}G_{\vec n\vec m}(\omega)=&\frac{i\hbar}{2\pi M}\frac{1}{N_xN_y(N_z+2)}\sum_{k_xk_y}\sum_{\mu=1}^{N_z+1}\mathrm{e}^{iak_x(n_x-m_x)+iak_y(n_y-m_y)}\times\\&\times\sin(n_z+1)\frac{\pi\mu}{N_z+2}\sin(m_z+1)\frac{\pi\mu}{N_z+2}\times\\&\times\frac{1}{\omega_{k_x,k_y,\mu}}\left(\frac{1}{\omega-\omega_{k_x,k_y,\mu}}-\frac{1}{\omega+\omega_{k_x,k_y,\mu}}\right).\end{aligned} \tag{4.41}$$

Spektralna intenzivnost Grinove funkcije je po definiciji data sa:

$$I_G(\omega)=\lim_{\delta\to0^+}\frac{G_{\vec n\vec m}(\omega+i\delta)-G_{\vec n\vec m}(\omega-i\delta)}{\mathrm{e}^{\frac{\hbar\omega}{\theta}}-1}. \tag{4.42}$$

Ako se u ovaj izraz zameni nađeni oblik Grinove funkcije i pri sređivanju iskoristi simbolička relacija:

$$\mathcal{P}\left\{\frac{1}{\omega\pm i\delta}\right\}=\mathcal{P}\left\{\frac{1}{\omega}\right\}\mp i\pi\delta(\omega). \tag{4.43}$$

Ova relacija se naziva simbolička, jer zapravo ima smisla samo pod integralom, ali spektralna intenzivnost i jeste podintegralna funkcija. Dakle dobija se:

$$\begin{aligned}I_G(\omega)=&\frac{\hbar}{M}\frac{1}{N_xN_y(N_z+2)}\sum_{k_xk_y}\sum_{\mu=1}^{N_z+1}\mathrm{e}^{iak_x(n_x-m_x)+iak_y(n_y-m_y)}\times\\&\times\sin(n_z+1)\frac{\pi\mu}{N_z+2}\sin(m_z+1)\frac{\pi\mu}{N_z+2}\times\\&\times\frac{1}{\omega_{k_x,k_y,\mu}}\frac{\delta(\omega-\omega_{k_x,k_y,\mu})-\delta(\omega+\omega_{k_x,k_y,\mu})}{\mathrm{e}^{\frac{\hbar\omega}{\theta}}-1}.\end{aligned} \tag{4.44}$$

Konačno, inverznom vremenskom Furije transformacijom, dobijamo rešenje polazne jednačine kretanja (4.16) po korelacionoj funkciji, koja je u stvari srednja vrednost proizvoda dva operatora pomeraja u različitim trenucima vremena:

$$< u_{\vec{m}}(0)|u_{\vec{n}}(t) >= \int\limits_{-\infty}^{+\infty} d\omega\, \mathrm{e}^{-i\omega t}\, I_G(\omega). \tag{4.45}$$

Zamenom $I_G(\omega)$ iz (4.44) u gornji definicioni izraz dobija se:

$$\begin{aligned} < u_{\vec{m}}(0)|u_{\vec{n}}(t) > = & \frac{\hbar}{M}\frac{1}{N_xN_y(N_z+2)}\sum_{k_xk_y}\sum_{\mu=1}^{N_z+1}\mathrm{e}^{iak_x(n_x-m_x)+iak_y(n_y-m_y)}\times \\ & \times\sin(n_z+1)\frac{\pi\mu}{N_z+2}\sin(m_z+1)\frac{\pi\mu}{N_z+2}\times \\ & \times\frac{1}{\omega_{k_x,k_y,\mu}}\left(\frac{\mathrm{e}^{-i\omega_{k_x,k_y,\mu}t}}{\mathrm{e}^{\frac{\hbar\omega_{k_x,k_y,\mu}}{\theta}}-1}-\frac{\mathrm{e}^{i\omega_{k_x,k_y,\mu}t}}{\mathrm{e}^{-\frac{\hbar\omega_{k_x,k_y,\mu}}{\theta}}-1}\right), \end{aligned} \tag{4.46}$$

a stavljajući $\vec{m}=\vec{n}$ i $t=0$, dobija se srednja vrednost kvadrata atomskih pomeraja:

$$\begin{aligned} < u_{\vec{n}}^2 > = & \frac{\hbar}{M}\frac{1}{N_xN_y(N_z+2)}\times \\ & \times\sum_{k_xk_y}\sum_{\mu=1}^{N_z+1}\frac{1}{\omega_{k_x,k_y,\mu}}\sin^2(n_z+1)\frac{\pi\mu}{N_z+2}\,\mathrm{cth}\,\frac{\hbar\omega_{k_x,k_y,\mu}}{2\theta}. \end{aligned} \tag{4.47}$$

To je veoma značajna veličina iz koje se mogu dobiti: potencijalna energija sistema mehaničkih oscilacija, gustina kristala i niz drugih termodinamičkih karakteristika. Vidi se da ona zavisi od indeksa sloja n_z i broja slojeva N_z.

4.3.2 Grinova funkcija tipa impuls-impuls

Ova Grinova funkcija se definiše na sledeći način:

$$G^{\alpha}_{\vec{n},\vec{m}}(t-t') \equiv \ll p_{\alpha,\vec{n}}(t)|p_{\alpha,\vec{m}}(t') \gg = \Theta(t-t') <[p_{\alpha,\vec{n}}(t), p_{\alpha,\vec{m}}(t')]>_0 \tag{4.48}$$

Da bi se dobila srednja vrednost kvadrata impulsa, trebalo bi ponoviti celu mukotrpnu proceduru iz prethodnog odeljka. Na sreću postoji i jedna elegantna prečica. Prvo se mora obratiti pažnja na relaciju (4.46), a zatim i na situaciju (4.17) kada je promenljiva t' zamenjena nulom. Da je ova promenljiva sve vreme bila „vučena” kroz račun, za srednju vrednost proizvoda pomeraja u različitim vremenskim trenucima dobilo bi se:

$$\begin{aligned} < u_{\vec{m}}(t')|u_{\vec{n}}(t) > = & \frac{\hbar}{M}\frac{1}{N_xN_y(N_z+2)}\sum_{k_xk_y}\sum_{\mu=1}^{N_z+1}\mathrm{e}^{iak_x(n_x-m_x)+iak_y(n_y-m_y)}\times \\ & \times\sin(n_z+1)\frac{\pi\mu}{N_z+2}\sin(m_z+1)\frac{\pi\mu}{N_z+2}\times \\ & \times\frac{1}{\omega_{k_x,k_y,\mu}}\left(\frac{\mathrm{e}^{-i\omega_{k_x,k_y,\mu}(t-t')}}{\mathrm{e}^{\frac{\hbar\omega_{k_x,k_y,\mu}}{\theta}}-1}-\frac{\mathrm{e}^{i\omega_{k_x,k_y,\mu}(t-t')}}{\mathrm{e}^{-\frac{\hbar\omega_{k_x,k_y,\mu}}{\theta}}-1}\right). \end{aligned} \tag{4.49}$$

Sada možemo „iskonstruisati" vezu koordinate i impulsa:

$$< p_{\vec{m}}(t')|p_{\vec{n}}(t) > \equiv M^2 \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t'}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} < u_{\vec{m}}(t')|u_{\vec{n}}(t) >,$$

pa sprovođenjem operacija diferenciranja nad izrazom (4.49) dobija se:

$$\begin{aligned} < p_{\vec{m}}(t')|p_{\vec{n}}(t) > = & \frac{\hbar M}{N_x N_y (N_z+2)} \sum_{k_x k_y} \sum_{\mu=1}^{N_z+1} \mathrm{e}^{iak_x(n_x-m_x)+iak_y(n_y-m_y)} \times \\ & \times \sin(n_z+1)\frac{\pi\mu}{N_z+2} \sin(m_z+1)\frac{\pi\mu}{N_z+2} \times \\ & \times \omega_{k_x,k_y,\mu} \left(\frac{\mathrm{e}^{-i\omega_{k_x,k_y,\mu}(t-t')}}{\mathrm{e}^{\frac{\hbar\omega_{k_x,k_y,\mu}}{\theta}} - 1} - \frac{\mathrm{e}^{i\omega_{k_x,k_y,\mu}(t-t')}}{\mathrm{e}^{-\frac{\hbar\omega_{k_x,k_y,\mu}}{\theta}} - 1} \right). \end{aligned} \tag{4.50}$$

Stavljajući $\vec{m} = \vec{n}$ i $t = t'$, dobija se srednja vrednost kvadrata impulsa oscilovanja u čvoru rešetke:

$$< p_{\vec{n}}^2 > = \frac{\hbar M}{N_x N_y (N_z+2)} \times \tag{4.51}$$

$$\times \sum_{k_x k_y} \sum_{\mu=1}^{N_z+1} \omega_{k_x,k_y,\mu} \sin^2(n_z+1)\frac{\pi\mu}{N_z+2} \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega_{k_x,k_y,\mu}}{2\theta} . \tag{4.52}$$

Ovo je, takođe, važan podatak iz koga se računa: kinetička energija sistema, koeficijent difuzije i druge karakteristike filma. Takođe zavisi od indeksa sloja n_z, kao i od broja slojeva $N - Z$.

4.4 Analiza nekih fizičkih karakteristika tankih filmova

Mikroanaliza, koja je završena nalaženjem zakona disperzije i srednjih vrednosti kvadrata pomeraja i impulsa, pokazuje da će fizičke karakteristike filma zavisiti od prostorne koordinate duž koje je translaciona simetrija narušena, kao i od broja slojeva. Upravo je ova činjenica odgovorna za sve posebnosti filma u odnosu na idealnu strukturu.

4.4.1 Fononski zakon disperzije

Za idealnu strukturu važi zakon dat pod (4.22). Dakle masivna struktura, sa prostom rešetkom ima minimalnu energiju fonona za $k = 0$:

$$E_{min} = 0. \tag{4.53}$$

Za tanki film fononski zakon disperzije je dat sa (4.40). S obzirom da je indeks μ počinje od jedinice, minimalna energija fonona za $k_x = k_y = 0$ je:

$$E_{0,0,1} = 2\hbar\Omega \sin\frac{\pi}{2(N_z+2)}. \tag{4.54}$$

Dakle tanki film ima neki energetski prag („gap"), ispod koga pojava fonona nije moguća, tj. postoje samo nulte oscilacije kristalne rešetke. Ovaj prag opada sa porastom broja slojeva. Neke vrednosti minimalne energije su date u tabeli:

N_z	E_{min}/k_B [K]	E_{min} [10^{-3}eV]
2	28.1	2.424
5	16.3	1.409
10	9.6	0.827

Za vrednost Debajeve energije je uzeto $\theta_D = \hbar\Omega = 200 k_B/\pi\sqrt{3}$. Vidi se da u troslojnom filmu postoje samo nulte oscilacije sve do temperature od 28 K. To znači da se, sa aspekta kretanja elektrona, tanak film do te temperature ponaša kao masivna struktura na apsolutnoj nuli, kada se elektroni kreću bez otpora. Treba imati u vidu da bezotporno kretanje elektrona i superprovodljivost nisu fenomeni sa istim uzrokom, ali da fenomenološki imaju istu posledicu - proticanje električne struje kroz uzorak bez merljivog otpora.

4.4.2 Kinetička energija po slojevima

Srednja vrednost kinetičke energije po atomu je data sa:

$$< T_{\vec{n}} >= \frac{1}{2M} < \vec{p}_{\vec{n}}^{\,2} > . \tag{4.55}$$

Kada se u izraz zameni (4.51) i nakon toga:

- Pređe sa sumiranja po $k_x k_y$, na integraciju, prema:

$$\sum_{k_x k_y} \longrightarrow \frac{N_x N_y a^2}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{k_{max}} dk\, k; \qquad k_{max} = \frac{\pi\sqrt{2}}{a}, \tag{4.56}$$

  a zatim smeni promenljiva $q = ak$.

- Uradi aproksimacija malih talasnih vektora, što znači da se u (4.40) sinusne funkcije od k_x i k_y zamene sa njihovim uglovima, dobija se:

$$< T_{\vec{n}} > = \frac{3\hbar\Omega}{4\pi} \frac{1}{N_z+2} \sum_{\mu=1}^{N_z+1} \sin^2(n_z+1)\frac{\pi\mu}{N_z+2} \times \tag{4.57}$$
$$\times \int_0^{\pi\sqrt{2}} dq\, q \sqrt{q^2 + 4\sin^2\frac{\pi\mu}{2(N_z+2)}}\ \mathrm{cth}\left(\frac{\hbar\Omega}{2\theta}\sqrt{q^2+4\sin^2\frac{\pi\mu}{2(N_z+2)}}\right).$$

U tabeli su date vrednosti za troslojni film ($N_z = 2$), na nekim temperaturama, pri čemu je uzeto da je Debajeva temperatura $\theta_D = \hbar\Omega = 200 k_B/\pi\sqrt{3}$:

n_z	$< T_{\vec{n}} >$ [10^{-21}J]		
	0 K	100 K	200 K
0	5,953	11,0179	20,1577
1	5,942	11,0177	20,1576
2	5,953	11,0179	20,1577

Ove vrednosti uključuju i kinetičku energiju nultih oscilacija. U Debajevoj teoriji fonona energija nultih oscilacija se ne uzima u obzir, pa ukoliko je potrebno uvek se mogu vrednosti na 0K oduzeti. Činjenice koje proizilaze is navedenih brojeva su:

- kinetička energija zavisi od indeksa sloja,
- na nižim temperaturama su veće razlike između slojeva,
- slaba je funkcija od temperature.

4.4.3 Potencijalna energija po slojevima

Na osnovu jednačine (4.15), jasno je da je potencijalna energija po jednom atomu, pod uslovom jednakosti Hukovih konstanti istezanja u sva tri pravca data izrazom:

$$\begin{aligned} W_{\vec{n}} = \frac{3}{4}C\Big[&(u_{n_x+1,n_y,n_z} - u_{n_x,n_y,n_z})^2 + (u_{n_x-1,n_y,n_z} - u_{n_x,n_y,n_z})^2 + \\ &(u_{n_x,n_y+1,n_z} - u_{n_x,n_y,n_z})^2 + (u_{n_x,n_y-1,n_z} - u_{n_x,n_y,n_z})^2 + \\ &(u_{n_x,n_y,n_z+1} - u_{n_x,n_y,n_z})^2 + (u_{n_x,n_y,n_z-1} - u_{n_x,n_y,n_z})^2\Big]. \end{aligned} \tag{4.58}$$

Radi izračunavanja srednje potencijalne energije po atomu: $< W_{\vec{n}} >$, neophodno je znati srednju vrednost proizvoda operatora koordinate u istom vremenskom trenutku, ali različitim tačkama (čvorovima). Na osnovu jednačine (4.46), sledi:

$$\begin{aligned} < u_{m_x,m_y,m_z}(0)|u_{n_x,n_y,n_z}(0) > = \frac{\hbar}{M}\frac{1}{N_xN_y(N_z+2)}\sum_{k_xk_y}\sum_{\mu=1}^{N_z+1} \mathrm{e}^{iak_x(n_x-m_x)+iak_y(n_y-m_y)} \times \\ \times \sin(n_z+1)\frac{\pi\mu}{N_z+2}\sin(m_z+1)\frac{\pi\mu}{N_z+2}\times \\ \times \frac{1}{\omega_{k_x,k_y,\mu}}\,\mathrm{cth}\,\frac{\hbar\omega k_x, k_y, \mu}{2\theta}\,. \end{aligned} \tag{4.59}$$

Ako se ovim putem razviju, na primer, prva dva sabirka iz (4.58), dobija se relacija:

$$\begin{aligned} &< (u_{n_x\pm1,n_y,n_z} - u_{n_x,n_y,n_z})^2 > = \\ &< u^2_{n_x\pm1,n_y,n_z} > -2 < u_{n_x\pm1,n_y,n_z}u_{n_x,n_y,n_z} > + < u^2_{n_x,n_y,n_z} > = \\ &\frac{\hbar}{M}\frac{1}{N_xN_y(N_z+2)}\sum_{k_xk_y}\sum_{\mu=1}^{N_z+1} 2(1-\mathrm{e}^{\mp iak_x})\frac{1}{\omega k_xk_y\mu}\sin^2(n_z+1)\frac{\pi\mu}{N_z+2}\,\mathrm{cth}\,\frac{\hbar\omega_{k_xk_y\mu}}{2\theta}\,. \end{aligned}$$

Zbog velikog broja atoma ($\sim 10^8$) u x i y pravcima, skokovi talasnih vektora k_x i k_y su vrlo sitni, pa se mogu aproksimirati kao kontinualne promenljive, što znači prelazak sa sumiranja na integraciju. Takođe problem ima takvu simetriju koja zahteva prelazak sa Dekartovih na polarne koordinate. Time dobijamo identičnu transformaciju onoj već primenjenoj u računu za srednju kinetičku energiju po atomu (4.56). Pri integrisanju izraza bitno je uočiti sledeće:

$$2(1-\mathrm{e}^{\mp iak_x}) = 4\sin^2\frac{ak_x}{2} \mp 2i\sin ak_x\,.$$

S obzirom da se integracija vrši u I Briluenovoj zoni $(-\pi/a, \pi/a)$, imaginarni član iz prethodnog izraza, koji sadrži neparnu funkciju, pomnožen sa ostatkom izraza koji je paran (jer je i zakon disperzije fonona parna funkcija) daje neparnu funkciju koja se onda integrali u simetričnim granicama, što kao rezultat daje nulu. Zato (u skladu sa fizičkim smislom) ostaje samo realni deo i on je oblika:

$$< (u_{n_x \pm 1, n_y, n_z} - u_{n_x, n_y, n_z})^2 > = \frac{\hbar}{M\Omega} \frac{1}{4\pi(N_z+2)} \sum_{\mu=1}^{N_z+1} J_3(\mu) \sin^2 (n_z+1) \frac{\pi\mu}{N_z+2} \,. \tag{4.60}$$

Pri čemu je, radi preglednosti, uvedeno:

$$J_s(\mu) = \int_0^{\pi\sqrt{2}} dq\, q^s \frac{\operatorname{cth}\left(\frac{\hbar\Omega}{2\theta}\sqrt{q^2 + 4\sin^2 \frac{\pi\mu}{2(N_z+2)}}\right)}{\sqrt{q^2 + 4\sin^2 \frac{\pi\mu}{2(N_z+2)}}} \,.$$

Iz prethodne analize postaje jasno, da je:

$$< (u_{n_x \pm 1, n_y, n_z} - u_{n_x, n_y, n_z})^2 > = < (u_{n_x, n_y \pm 1, n_z} - u_{n_x, n_y, n_z})^2 > \,.$$

Znači druga dva sabirka izraza (4.58), daju isto rešenje (4.60).

Istim rezonovanjem, dakle koristeći relaciju (4.59), a zatim prelaskom sa sumiranja na integraciju po (4.56), dobijaju se preostala dva sabirka iz (4.58):

$$\begin{aligned} < (u_{n_x, n_y, n_z+1} - u_{n_x, n_y, n_z})^2 > =& \frac{\hbar}{M\Omega} \frac{2}{\pi(N_z+2)} \times \\ & \times \sum_{\mu=1}^{N_z+1} J_1(\mu) \sin^2 \frac{\pi\mu}{2(N_z+2)} \cos^2 \frac{\pi\mu}{N_z+2} \frac{2n_z+3}{2}, \\ < (u_{n_x, n_y, n_z-1} - u_{n_x, n_y, n_z})^2 > =& \frac{\hbar}{M\Omega} \frac{2}{\pi(N_z+2)} \times \\ & \times \sum_{\mu=1}^{N_z+1} J_1(\mu) \sin^2 \frac{\pi\mu}{2(N_z+2)} \cos^2 \frac{\pi\mu}{N_z+2} \frac{2n_z+1}{2}. \end{aligned} \tag{4.61}$$

Zamenjujući nađene srednje vrednosti proizvoda operatora (4.60) i (4.61) u zakon za potencijalnu energiju (4.58), dobija se kao krajnji izraz:

$$\begin{aligned} < W_{\vec{n}} > =& \frac{3\hbar\Omega}{4\pi} \frac{1}{N_z+2} \sum_{\mu=1}^{N_z+1} \Big[J_3(\mu) \sin^2 (n_z+1) \frac{\pi\mu}{N_z+2} + \\ & + 2J_1(\mu) \sin^2 \frac{\pi\mu}{2(N_z+2)} \left(1 + \cos (n_z+1) \frac{2\pi\mu}{N_z+2} \cos \frac{\pi\mu}{N_z+2}\right)\Big]. \end{aligned}$$

U sledećoj tabeli su date vrednosti za troslojni film ($N_z = 2$), na nekim temperaturama, pri čemu je uzeto da je Debajeva temperatura $\theta_D = \hbar\Omega = 200k_B/\pi\sqrt{3}$:

n_z	$< W_{\vec{n}} >$ $[10^{-21}\mathrm{J}]$		
	0 K	100 K	200 K
0	5,658	10,375	18,951
1	5,932	10,933	19,987
2	5,658	10,375	18,951

Iz tabele se vidi da i potencijalna energija zavisi od sloja, i to tako da je najveća u unutrašnjem sloju, što je fizički opravdano, jer su u graničnim slojevima atomi poluslobodni (imaju veću kinetičku energiju). Takođe je slaba funkcija od temperature.

Iz vrednosti kinetičke i potencijalne energije nalazi se unutrašnja energija fononskog gasa, a preko nje sve bitne termodinamičke karakteristike, kao na primer, specifični toplotni kapacitet po slojevima.

5 Zaključak

U radu je prikazan originalan metod operatorskog rešavanja homogenih diferencnih jednačina drugog reda. Ovaj metod uspešno je primenjen na izučavanje ponašanja osnovnih pobuđenja u fizici čvrstog stanja – fonona u ultratankim filmovima.

Na osnovu formiranog modela nanokristalnog filma sa slobodnim graničnim površinama, sprovedene su analize dobijenog zakona disperzije. Pokazana je i mogućnost prostiranja mehaničkih poremećaja u obliku superpozicije stojećih talasa izrazito diskretnog energetskog spektra fonona. Pomoću izračunatih Grinovih funkcija tipa pomeraj-pomeraj, impuls-impuls i pomoću spektralne intenzivnosti Grinovih funkcija određene su srednje vrednosti kvadrata pomeraja i kvadrata impulsa, dakle dve fundamentalne karakteristike koje definišu i pomoću kojih su određeni izrazi za srednje vrednosti potencijalne i kinetičke energije ovog sistema.

Izveden je i vrlo važan zaključak da ove veličine zavise od udaljenosti od graničnih površi, odnosno, da su definisane za određenu kristalografsku ravan paralelnu graničnim površima. Ovaj dvodimenzioni efekat je već eksperimentalno uočena pojava, npr. kod visokotemperaturskih superprovodnih keramika.

6 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.Spasojević i Z.V.Popović:
   ELEKTROTEHNIČKI I ELEKTRONSKI MATERIJALI,
   Promezzia, 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. B.S.Tošić, V.D.Sajfert, D.Popov, J.P.Šetrajčić:
    PRIMENA DIFERENCNOG RAČUNA U ANALIZI NANOSTRUKTURA
    VANU, Novi Sad 2005.