

FONONSKI SPEKTRI U KVANTNIM ŽICAMA*

U radu je izvršena analiza fononskih spektara i dozvoljenih fononskih stanja kvantne žice sa prostom kubnom kristalnom strukturom primenom dvovremenskih temperaturskih retardovanih Grinovih funkcija, a potom je izvršeno njihovo poređenje sa energetskim spektrima fonona u neograničenim kristalnim strukturama i tankim filmovima. Rezultati istraživanja predstavljani su grafički za razne vrednosti graničnih parametara. Sprovedene analize su pokazale bitne razlike u zakonu disperzije fonona u pomenutim sistemima, kao isključivu posledicu postojanja granica odgovarajuće strukture, u kojima energetski spektri poseduju energetske gepove. Još jedan važan rezultat je diskretnost zone dozvoljenih fononskih energija u konfiniranim kristalnim strukturama, za razliku od praktično kontinualnih fononskih spektara u bal-kovskim materijalima.

Kvantne žice [1–3] predstavljaju ograničene kristalne strukture kod kojih se uslovi na granicama razlikuju od onih u unutrašnjosti, tj. translaciona simetrija narušena je duž pravaca normalnih na žicu (y i z pravci).

Ako unutar žice (između njenih graničnih površina) nema nikakvih deformacija (narušenja) kristalne strukture (kristalna rešetka je bez primesa, vakancija i sl.), onda se ona naziva idealnom žicom [2]. U suprotnom, ako ove deformacije postoje (npr. kao posledice dopiranja stranim atomima), tada se ta struktura naziva deformisanom žicom. U ovom radu posmatra se idealna ultratanka žica kubne kristalne strukture (slika 1) načinjena u/ili na supstratu nekim tehničko–tehnološkim postupkom (naparavanjem, raspršivanjem i sl.), čiji su osnovni kristalografski podaci:

$$a_x = a_y = a_z \equiv a; N_x \sim 10^8 \gg N_{y,z} \sim 10;$$

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

$$C_{n_x, n_y, n_z; n_x, n_y, n_z \pm 1}^{\alpha} \equiv C^{\alpha};$$

$$C_{n_y, 0, n_y-1}^{\alpha} = C_{n_y-1, 0, n_y}^{\alpha} = (1 + \varepsilon) C^{\alpha};$$

$$C_{n_y, N_z, n_y, N_z+1}^{\alpha} = C_{n_y, N_z+1, n_y, N_z}^{\alpha} = (1 + \gamma) C^{\alpha};$$

$$C_{0, n_z, -1, n_z}^{\alpha} = C_{-1, n_z, 0, n_z}^{\alpha} = (1 + \sigma) C^{\alpha};$$

$$C_{N_y, n_z; N_y+1, n_z}^{\alpha} = C_{N_y+1, n_z; N_y, n_z}^{\alpha} = (1 + \varphi) C^{\alpha};$$

($\varepsilon, \gamma, \sigma, \varphi$) ≥ -1 , gde je α konstanta kristalne rešetke, $N_{x/y/z}$ su brojevi atoma duž x, y i z ose, C^{α} – Hukova konstanta elastičnosti u α pravcu i $N_{y/z} \in (0, 1, 2, \dots, N_{y/z})$ – indeksi rešetke duž y i z pravaca. Vektor $\vec{\lambda}$ povezuje atom na mestu \vec{n} sa njegovim najbližim susedima. Na osnovu toga, o modelu se može zaključiti sledeće:

1. Kvantne žice poseduju četiri granične površine: dve paralelne XY ravnima (i to za $z = 0$ i $z = L_z = N_z a$) i dve paralelne XZ ravnima (i to za $y = 0$ i $y = L_y = N_y a$), dakle, ograničene su duž y i z pravaca i neograničene duž x pravca.

2. Duž y/z ose locirano je $N_{y/z} + 1$ atoma.

3. Torzione konstante $C^{\alpha\beta}$ zanemarljive su u odnosu na konstante istezanja C^{α} .

4. Smatra se da atomi koji pripadaju graničnim slojevima prikazane kvantne žice interaguju sa spoljašnjim sredinama, bez obzira na to što duž y i z pravaca (levo od leve i desno od desne, odnosno, iznad gornje i ispod donje granične površine) nema atoma (motiva, čvorova) žice. Granični atomi su, međutim, "spregnuti" izmenjenim Hukovim silama za atome sredina – supstrata koji ih okružuju [1–5]. U skladu sa napred navedenim uslovima, konstante elastičnosti koje opisuju interakcije atoma graničnih površina sa spoljašnjim sredinama, modifikovane su odgovarajućim koeficijentima ε i γ, σ i φ .

Uzimajući u obzir sve ove uslove i činjenicu da su slojevi za $n_y \leq -1$ i $n \geq N_y + 1$, kao i za $n_z \leq -1$ i $n_z \geq N_z + 1$ odsutni, moramo obračunati i sledeće:

$$u_{\alpha, n, n, n_z} = 0; -1 \geq n_{y,z} \wedge n_{y,z} \geq N_{y,z} + 1;$$

$$(n_{y,z} \notin \lfloor 0, N_{y,z} \rfloor).$$

Polazna tačka teorijskog pristupa analizi opisanog modela je standardni Hamiltonijan fononskog podsistema u neograničenim kristalnim strukturama, napisan u harmonijskoj aproksimaciji, kao i u aproksimaciji najbližih suseda, koji je prilagođen modelu kvantne žice prikazanom na slici 1:

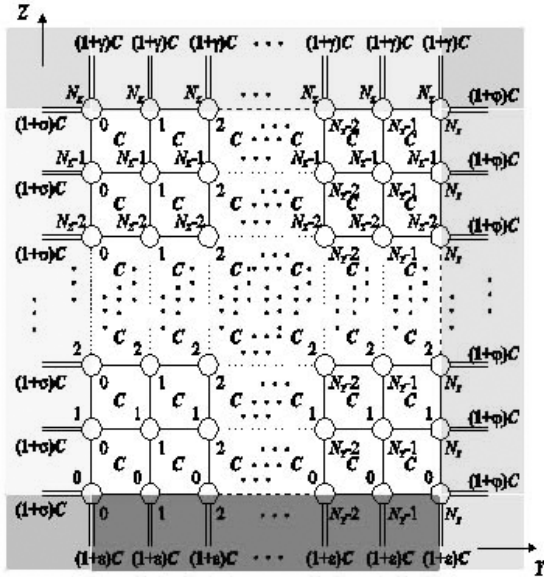
*Rad saopšten na skupu "Peti seminar mladih istraživača", Beograd, decembar 25–26. 2006.

Adresa autora: D. Ilić, Fakultet tehničkih nauka, Univerzitet u Novom Sadu, Novi Sad

E-mail: idilic@eunet.yu

Rad primljen: Decembar 25, 2007.

Rad prihvaćen: Januar 23, 2007.



Slika 1. Poprečni presjek (duž X-ravni) modela kvantne žice
Figure 1. Cross section (along the X-plane) of the quantum-wire model

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

$$V_{eff} = \sum_{\alpha, n_x, n_y, n_z} \frac{C_{\alpha}}{4} [(u_{\alpha, n_x+1, n_y, n_z} - u_{\alpha, n_x, n_y, n_z})^2 +$$

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

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

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

gde su: $u_{\alpha, \vec{n}}$ – mali pomeraji atoma na mestu \vec{n} iz svog ravnotežnog položaja u pravcu α , a $p_{\alpha, \vec{n}}$ – odgovarajući impulsi. M je masa atoma.

Zakon disperzije fonona potražićemo primenom dvovremenske temperaturske retardovane Grinove funkcije oblika:

$$G_{\vec{n}, \vec{m}}^{\alpha}(t-t') \equiv \langle \langle u_{\alpha, \vec{n}}(t) | u_{\alpha, \vec{m}}(t') \rangle \rangle =$$

$$= \Theta(t-t') \langle [u_{\alpha, \vec{n}}(t), u_{\alpha, \vec{m}}(t')] \rangle_0 \quad (1)$$

koja zadovoljava jednačinu kretanja:

$$-M\omega^2 G_{\vec{n}, \vec{m}}^{\alpha}(\omega) = -\frac{i\hbar}{2} \pi \delta_{\vec{n}, \vec{m}} +$$

$$+ \frac{1}{i\hbar} \langle \langle [p_{\alpha, \vec{n}}, H] | u_{\alpha, \vec{m}} \rangle \rangle_{\omega}. \quad (2)$$

Kao i kod film-struktura [10], i ovde se moraju izračunati odgovarajući komutatori, odnosno odrediti Grinove funkcije posebno za atome graničnih slojeva,

a posebno za atome iz unutrašnjosti filma. Preimenovanjem $m \rightarrow n$ i zamenom nađenih komutatora u jednačinu kretanja (2) za Grinove funkcije (1), te primenom delimične Furijeove transformacije (samo duž x – pravca, gde je posmatrana struktura neograničena)

$$G_{n_x, n_y, n_z, \vec{m}}^{\alpha}(\omega) = \frac{1}{N_x} \sum_{k_x} e^{ik_x \alpha (n_x - m_x)} G_{n_y, n_z, m_y, m_z}^{\alpha}(k_x; \omega)$$

$$\delta_{n_x, m_x} \delta_{n_y, m_y} \delta_{n_z, m_z} = \frac{1}{N_x} \sum_{k_x} e^{ik_x \alpha (n_x - m_x)} \delta_{n_y, m_y} \delta_{n_z, m_z}$$

dobija se sistem od $(N_y + 1) \times (N_z + 1)$ diferencnih jednačina koji u opštem slučaju nema analitičko rešenje, pa ćemo ga potražiti za slučaj slobodnih površina, kada se površinske perturbacije zanemaruju ($\varepsilon = \varphi = \gamma = \sigma = 0$). Na osnovu opštih algebarskih stavova [13], jasno je da se nepoznate Grinove funkcije iz (2) mogu izraziti kao:

$$G_{n_y, n_z} = \frac{\mathfrak{R}_{n_y, n_z}}{\mathfrak{R}_{N_y+1, N_z+1}}$$

gde \mathfrak{R}_{n_y, n_z} predstavlja odgovarajuću "zamensku" determinantu, a $\mathfrak{R}_{N_y+1, N_z+1} - 2D$ kvadratnu determinantu sistema. U cilju osnovnog zadatka ovog istraživanja, a to je određivanje fononskih energija, potrebni su nam polovi Grinovih funkcija, koji se dobijaju kada iste teže beskonačnosti, što znači da mora biti:

$$\mathfrak{R}_{N_y+1, N_z+1} \equiv 0.$$

Kako $\mathfrak{R}_{N_y+1, N_z+1}$ predstavlja poznatu $2D$ determinantu sistema, ona može da se izrazi preko karakterističnih Čebiševljevih polinoma druge vrste, čime se dobija zakon disperzije fonona u kvantnim žicama:

$$E_k^{\alpha} = 2\sqrt{\sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y(\mu)}{2} + \sin^2 \frac{ak_z(\nu)}{2}} \quad (3)$$

čiji je oblik sličan odgovarajućem za beskonačne kristalne strukture. Glavna razlika sastoji se u tome što fononski kvaziimpuls u kvantnim žicama uzima diskretne vrednosti u y i z pravcima duž kojih je struktura ograničena, dok je duž x pravca kontinualan. Takođe se može uočiti da je minimalna energija fonona u kvantnim žicama različita od nule (za $k_z^{\min} = 0$) i iznosi:

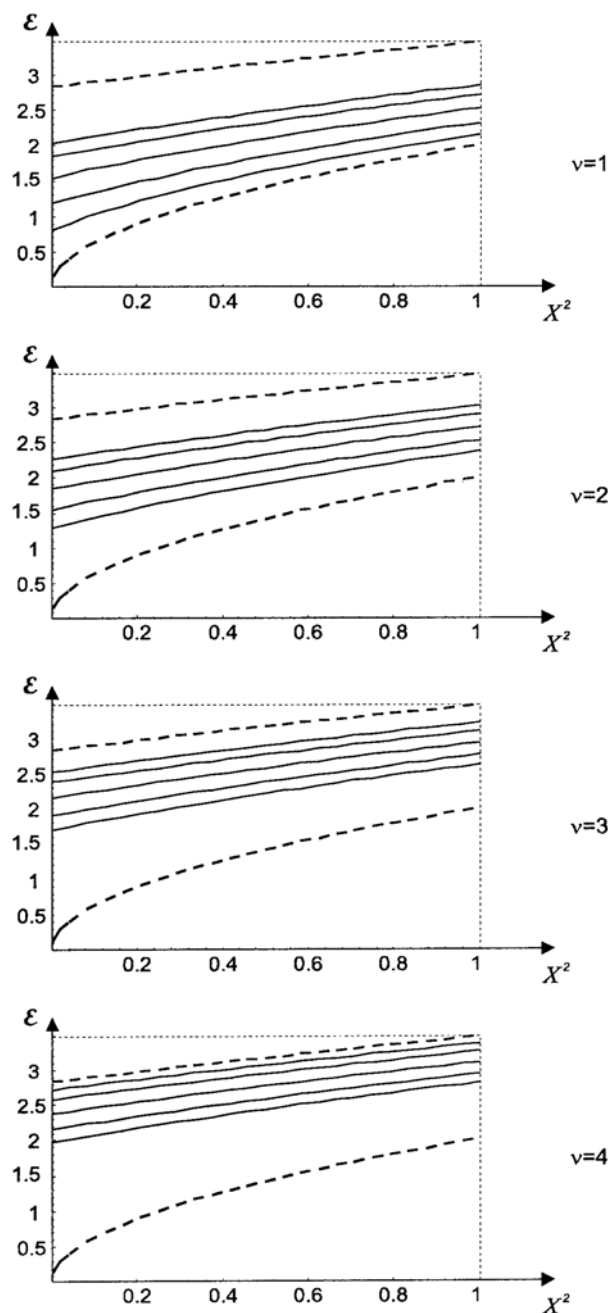
$$\Delta_{\min} = E_{k_{\min}}^{\alpha} = E_{k_x=0, k_{y,z}=k_{y,z}^{\min}} =$$

$$= 2\sqrt{\sin^2 \frac{ak_y^{\min}(\mu)}{2} + \sin^2 \frac{ak_z^{\min}(\nu)}{2}}, \quad (4)$$

gde je:

$$k_y^{\min}(\mu) = k_y(1) = \frac{\pi}{\alpha} \frac{1}{N_y + 2}; \quad k_z^{\min}(\nu) = k_z(1) = \frac{\pi}{\alpha} \frac{1}{N_z + 2}$$

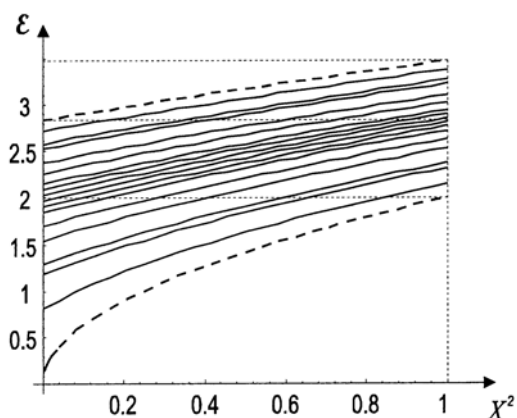
dok su $\mu = 1, 2, \dots, N_y + 1$ i $\nu = 1, 2, \dots, N_z + 1$ brojevi slojeva duž y i z pravaca respektivno.



Slika 2. Parcijalni fononski spektar $E=E_{\mu,v}(X^2)$, $X \equiv \sin(\alpha k_x/2)$
 Figure 2. Partial phonon spectra $E=E_{\mu,v}(X^2)$, $X \equiv \sin(\alpha k_x/2)$

Na slikama 2 i 3 grafički su predstavljene osnovne karakteristike fononskog spektra (dozvoljenih energija) u kvantnim žicama. Isprekidane linije označavaju kontinualne zone dozvoljenih fononskih energija u neograničenim strukturama. Upoređivanjem ovih spektara sa istim u neograničenim i film-strukturama možemo jasno uočiti najbitnije razlike.

Prvo, kontinualna zona dozvoljenih fononskih energija balk-struktura se pod uticajem dveju paralelnih graničnih površina kod filma cepa na diskretan



Slika 3. Kompletan fononski spektar
 Figure 3. Full-scale phonon spectra

niz kontinualnih (monoslojnih, ili dvodimenzionih) podzona čiji je broj jednak broju atomskih slojeva između dve granične površine filma. U kvantnim žicama se svaka od tih podzona (posebno za $v = 1$, za $v = 2$, pa $v = 3$, i za $v = 4$, jer je prikazana kvantna žica sa 4 monoatomska sloja duž jednog pravca ograničenja) cepa na diskretan niz kontinualnih (monolančanih ili jednodimenzionih) podpodzona čiji je broj jednak broju atomskih slojeva između druge dve granične površine.

Kompletan spektar mogućih (dozvoljenih) diskretnih fononskih energija (zonskih – balkovskih i podpodzonskih – u žicama) za slučaj 5×4 slojnih kvantnih žica prikazani su na slici 3. Vidi se da dolazi do preklapanja nekih podpodzonskih nivoa koji pripadaju različitim energetske podzonama. Pored toga, primetni su dodatni energetske gepovi (za film i za žicu), koji su isključiva posledica postojanja prostornih granica. Veličina gepa određena je izrazom (4).

ZAKLJUČAK

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

1. Ove analize su pokazale bitne razlike u zakonu disperzije fonona u pomenutim sistemima, kao isključive posledice postojanja granica odgovarajuće strukture, u kojima energetske spektri poseduju energetske gepove. Veličine gepova zavise od dimenzija uzoraka (debljine filma, odnosno, debljine i širine žice) i veoma brzo, praktično parabolički, opadaju sa njihovim povećanjem.

2. Postojanje graničnih uslova ima za posledicu promenu energetske zone fonona. U odnosu na zonu dozvoljenih energija idealnih struktura sa praktično kontinualnim rasporedom, zona fononskih dozvolje-

nih energija u filmu je izrazito diskretna. Ona se sastoji od dvodimenzionih podzona. U svakoj od podzona energija uzima kontinualne vrednosti. Povećanjem broja slojeva filma povećava se broj diskretnih stanja unutar zone dozvoljenih energija. Kod kvantnih žica ova diskretnost je dvodimenziona – duž oba pravca gde postoje granične površine, što znači da se kontinualnost podzona narušava i one dobijaju diskretn karakter.

3. Spektri fonona u kvantnim žicama poseduju donji i gornji energetski gep. Posledica postojanja donjeg energetskog gepa može da se tumači na sledeći način: on odgovara energiji osnovnog stanja fononskog sistema i predstavlja najmanju energiju koju treba uložiti da bi se u filmu pojavili akustički fononi (optičkog tipa). Sve do te energije (aktivacione temperature) fononi se mogu nalaziti samo u nekim od vezanih stanja, npr. sa elektronima u Kuperovim parovima. Do te temperature ceo sistem se ponaša kao zamrznut. U kvantnim žicama ovi kvantno–dimenzijski efekti, pa i aktivaciona temperatura, su znatno izraženiji – veći za preko 40%.

4. Sve razlike između posmatranih (neograničenih i ograničenih) kristalnih sistema su izraženije što je film tanji, a žica tanja i uža, i iščezavaju kada debljina filma, odnosno debljina i širina kvantne žice, teže beskonačnosti.

SUMMARY

PHONON SPECTRA IN QUANTUM WIRES

(Scientific paper)

Dušan Ilić¹, Dejan Raković², Jovan Šetrajčić³

¹Faculty of Technical Sciences, University of Novi Sad, Novi Sad

²Faculty of Electrical Engineering, University of Belgrade, Belgrade

³Faculty of Sciences, Department of Physics, University of Novi Sad, Novi Sad

Green's function method, adjusted to bound crystalline structures, was applied to obtain the phonon dispersion law in quantum wires. The condition of the existence of small mechanical atom movements defining phonon spectra can be found by solving the secular equation. This problem was presented graphically for different boundary parameters. The presence of boundaries, as well as the change of boundary parameters, leads to the appearance of new properties of the layered structure. The most important feature is that, beside the allowed energy zones (which are continuous as in the bulk structure), zones of forbidden states appear. Different values of the boundary parameters lead to the appearance of lower and upper energy gaps, or dispersion branches spreading out of the bulk energy zone. The spectra of phonons in corresponding unbound structures were correlated to those in bound structures.

LITERATURA

- [1] D. Raković, Fizičke osnove i karakteristike elektrotehničkih materijala, Elektrotehnički fakultet, Beograd, 1995.
- [2] Z. Ikonić, V. Milanović, Poluprovodničke kvantne mikrostrukture, Univerzitet u Beogradu, Beograd, 1997.
- [3] M. Tadić, Poluprovodničke nanostrukture, Zadužbina Andrejević, Beograd, 1999.
- [4] S.G. Davison, M. Steslicka, Basic Theory of Surface States, Clarendon Press, Oxford, 1996.
- [5] M.G. Cottam, D.R. Tilley, Introduction to Surface and Superlattice Excitations, University Press, Cambridge, 1989.
- [6] M. Pruton, Introduction to Surface Physics, Clarendon Press, Oxford, 1995.
- [7] W. Jones, N.H. March, Theoretical Solid State Physics, Dover, New York 1985.
- [8] C. Kittel, Quantum Theory of Solids, Wiley, New York, 1963.
- [9] B.S. Tošić, Statistička fizika, Institut za fiziku PMF, Novi Sad, 1978.
- [10] G. Rickayzen, Green's Functions and Condensed Matter, Academic Press, London, 1980.
- [11] S.K. Jaćimovski, D.I. Ilić, I.K. Junger and J.P. Šetrajčić, Microtheoretical and Numerical Calculation of Phonon Spectra in Superlattices, J. Math. (Novi Sad) 31 (1) (2001) 55–64
- [12] L.A. Gribov, Theory of Infrared Spectra of Polymers, Nauka, Moskva, 1977.
- [13] D.S. Mitrinović, D. Mihailović, P.M. Vasić, Linearna algebra, polinomi, analitička geometrija, Građevinska knjiga, Beograd, 1990.

Ključne reči: Fononi • Zakon disperzije • Kvantne žice •

Key words: Phonons • Dispersion law • Quantum wires •