Zbornik radova 49. Konferencije za ETRAN, Budva, 5-10. juna 2005, tom IV
Proc. 49th ETRAN Conference, Budva, June 5-10, 2005, Vol. IV

DINAMIČKE I TERMODINAMIČKE SPECIFIČNOSTI MEHANIČKIH OSCILACIJA U ULTRATANKIM FILMOVIMA

Vjekoslav Sajfert, *Tehnički fakultet "Mihajlo Pupin", Zrenjanin, Univerzitet u Novom Sadu*
Jovan P. Šetrajčić, *Prirodno-matematički fakultet, Univerzitet u Novom Sadu*
Dušan Popov, *Universitatea "Politechnica", Timisoara, Romania*
Bratislav S. Tošić, *Vojvođanska Akademija nauka i umetnosti, Novi Sad*

Sadržaj – *Nađene su Grinove funkcije tipa pomeraj-pomeraj i tipa impuls-impuls u ultratankom filmu. Zbog narušenja simetrije, fizičke karakteristike ultratankog filma zavise od prostorne koordinate u pravcu narušenja simetrije. Konstatovano je da je za pobuđivanje fonona u tankom filmu potrebna energija pobuđivanja koja je utoliko veća ukoliko je film tanji. Ispitani su gustina filma, specifična toplota, koeficijent toplotne provodnosti i koeficijent difuzije. Nađeno je da je potrebna energija za pobuđivanje fonona u troslojnom filmu reda 100 k_B ako je Debajeva temperatura 200K, da je gustina filma najmanja u srednjim slojevima filma i da raste ka granicama. Na niskim temperaturama specifična toplota i koeficijent toplotne provodnosti filma su za nekoliko redova veličine niži nego u odgovarajućoj idealnoj strukturi. Koeficijent difuzije fonona ne zavisi ni od temperature ni od koordinata.*

1. UVOD

Tanki filmovi [1–4] su strukture sa narušenom simetrijom u jednom pravcu. Ovakve strukture se mogu analizirati preko jednočestične talasne funkcije, ali ovakav prilaz nije zatvoren u sebe, jer se za izračunavanje statističkih srednjih vrednosti moraju "zajmiti" statističke formule. Jedini u sebe zatvoreni metod je metod Grinovih funkcija, jer on daje i dinamičke i statističke karakteristike sistema. Treba napomenuti da se u primeni metoda Grinovih funkcija na strukture sa narušenom simetrijom i danas još uvek luta [5–8]. Razlog ovome je činjenica da u pravcu narušenja simetrije Grinova funkcija ne zavisi od razlike prostornih indeksa, već od svakog od njih ponaosob. Ovaj problem se rešava u nekim radovima tako što se ispituje Grinova funkcija dijagonalno po prostornim indeksima u pravcu narušenja simetrije, ili se uzima da Grinova funkcija zavisi od razlike prostornih koordinata u pravcu narušenja simetrije, pa se zatim popravke vrše u njenom Furije-liku, koji zavisi od impulsa, na osnovu činjenice da se komponenta impulsa u pravcu simetrije ne održava. Oba pomenuta prilaza ili uopšte ne reprodukuju osnovnu karakteristiku sistema sa narušenom simetrijom, ili je samo delimično reprodukuju, a ta osobina je zavisnost fizičkih karakteristika strukture sa narušenom simetrijom od prostornih koordinata. Cilj ovog rada je da formuliše korektnu metodologiju računanja Grinovih funkcija [9–10] u strukturama sa narušenom simetrijom i da je primeni na analizu mehaničkih oscilacija na ultratankom filmu.

2. GRINOVE FUNKCIJE TIPA POMERAJ-POMERAJ I IMPULS-IMPULS

Hamiltonijan mehaničkih oscilacija u filmu uzet u aproksimaciji najbližih suseda i uz zanemarivanje torzionih efekata je oblika

$$H = \frac{1}{2M}\sum_{\vec{n}} p_{\vec{n}}^2 + \frac{C}{2}\sum_{\vec{n}}\Big[\big(u_{\vec{n}} - u_{\vec{n}-\vec{a}_x}\big)^2 + \big(u_{\vec{n}} - u_{\vec{n}-\vec{a}_y}\big)^2 + \big(u_{\vec{n}} - u_{\vec{n}-\vec{a}_z}\big)\Big]^2, \tag{2.1}$$

gde su u – pomeraji, p – impulsi, M – mase molekula i C – Hukove konstante istezanja.

Grinova funkcija tipa pomeraj-pomeraj data je sa:

$$\Psi_{\vec{n},\vec{m}}(t) \equiv \Psi_{n_x,n_y,n_z;m_x,m_y,m_z}(t) \equiv$$
$$\equiv \langle\langle u_{\vec{n}}(t) | u_{\vec{m}}(0)\rangle\rangle = \theta(t) \langle [u_{\vec{n}}(t), u_{\vec{m}}(0)]\rangle, \tag{2.2}$$

a tipa impuls-impuls:

$$\Phi_{\vec{n},\vec{m}}(t) \equiv \Phi_{n_x,n_y,n_z;m_x,m_y,m_z}(t) \equiv$$
$$\equiv \langle\langle p_{\vec{n}}(t) | p_{\vec{m}}(0)\rangle\rangle = \theta(t) \langle [p_{\vec{n}}(t), p_{\vec{m}}(0)]\rangle. \tag{2.3}$$

gde je $\theta(t)$ Hevisajdova step funkcija.

Pri rešavanju jednačina za ove Grinove funkcije korišćena je činjenica da je film u x i y pravcu translatorno invarijantan. U pravcu narušenja simetrije granični uslovi su

$$\begin{aligned} u(n_z = -1) &= u(n_z = N_z - 1) = 0; \\ p(n_z = -1) &= p(n_z = N_z - 1) = 0. \end{aligned} \tag{2.4}$$

Zbog graničnih uslova jednačine za određivanje Ψ i Φ raspadaju se na sistem od tri jednačine. Zbog toga su komponente funkcija Ψ i Φ zavisne od indeksa sloja n_z morale da se razvijaju po stojećim talasima oblika $\sin(N_z + 2)\varphi_\mu$, gde je parametar φ_μ dat sa:

$$\varphi_\mu = \frac{\pi\mu}{N_z + 2}; \qquad \mu = 1,2,\ldots,N_z + 1. \tag{2.5}$$

Veoma bitna činjenica je to da u formuli (2.5) broj μ nije mogao da uzme vrednost 0 i N_z+2, jer bi tada Grinove funkcije Ψ i Φ bile jednake nuli.

Za Kronekrov simbol u z pravcu korišćena je reprezentacija stojećih talasa:

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

$$\cdot\sin(m_z+1)\frac{\pi\mu}{N_z+2}\,. \tag{2.6}$$

Opisanim postupkom nađene su Grinove funkcije Ψ i Φ, njihov pol u E ravni dao je sledeću vrednost za zakon disperzije fonona u filmu:

$$E = 2\hbar\Omega\sqrt{\sin^2\frac{a_x k_x}{2}+\sin^2\frac{a_y k_y}{2}+\sin^2\frac{\pi\mu}{2(N_z+2)}}\,;$$

$$\Omega=\sqrt{\frac{C}{M}}\,;\ \mu=1,2,\ldots,N_z+1\,. \tag{2.7}$$

Nakon ovoga, uobičajenom procedurom određene su spektralne intenzivnosti funkcija Ψ i Φ i preko njih odgovarajuće korelacione funkcije $< u_{m_x,m_y,m_z}(0)\,u_{n_x,n_y,n_z}(t) >$ i $< p_{m_x,m_y,m_z}(0)\,p_{n_x,n_y,n_z}(t) >$. Kod ovih korelacionih funkcija nađene su srednje vrednosti kvadrata pomeraja i kvadrata impulsa i one su bile date forulama:

$$< u_n^2 > = \frac{\hbar}{M}\frac{1}{N_x N_y}\frac{1}{N_z+2}\sum_{k_x,k_y}\sum_{\mu=1}^{N_z+1}\frac{1}{\omega_{k_x,k_y,\mu}}\cdot$$

$$\cdot\sin^2(n_z+1)\frac{\pi\mu}{N_z+2}\coth\frac{\hbar\omega_{k_x,k_y,\mu}}{2\Theta}\,; \tag{2.8}$$

$$< p_n^2 > = \frac{\hbar M}{N_x N_y (N_z+2)}\sum_{k_x,k_y}\sum_{\mu=1}^{N_z+1}\omega_{k_x,k_y,\mu}\cdot$$

$$\cdot\sin^2(n_z+1)\frac{\pi\mu}{N_z+2}\coth\frac{\hbar\omega_{k_x,k_y,\mu}}{2\Theta}\,. \tag{2.9}$$

Iz dobijenih izraza se vidi da za razliku od idealne strukture (makroskopska struktura bez defekata) srednji kadrati pomeraja i impulsa zavise od prostorne koordinate n_z.

3. ANALIZA REZULTATA

Na osnovu izraza za energiju fonona (2.7) minimalna energija fonona se dobija za k_x=k_y=0 i μ=1. Ova minimalna vrednost iznosi:

$$E_{min} = 2\hbar\Omega\sin^2\frac{\pi}{2(N_z+2)} \tag{3.1}$$

Iz ove relacije se vidi da minimalna energija opada sa porastom broja slojeva.

Kao što se vidi minimalna fononska energija u filmu nije jednaka nuli kao u idealnoj strukturi i za troslojni film (N_z=2) iznosi $2\hbar\Omega\sin^2\frac{\pi}{8}$ što za debajevske temperature reda 200K daje prag energije za fonone koji je reda 100k_B. Ova činjenica je veoma značajna jer praktično znači da se do temperature od 100 K film ponaša kao idealna struktura na apsolutnoj nuli, tj. ne pruža nikakav otpor kretanju elektrona. Zbog toga je realno očekivati da ultratanki metalni filmovi imaju vi[u superprovodnu kritičnu temperaturu nego odgovarajuća makrostruktura.

Pomoću srednjeg kvadrata pomeraja u filmu određena je gustina filma

$$\rho = \frac{m}{a^3\left(1-3\frac{< u_n^2 >}{a^2}\right)} \tag{3.2}$$

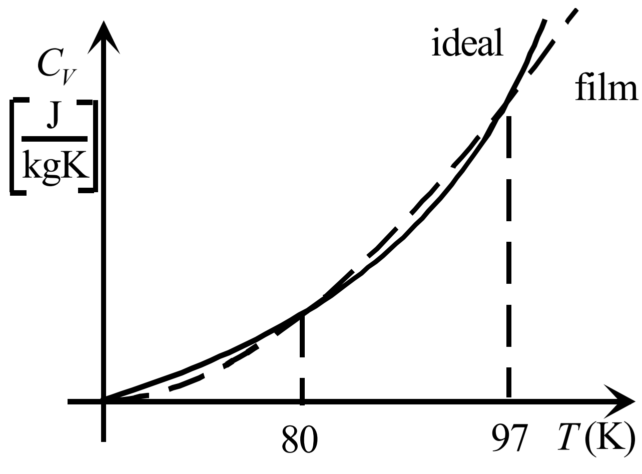
Pošto $< u_n^2 >$ zavisi od n_z, gustina filma se menja od sloja do sloja i njene vrednosti za ultratanki film su najveće u graničnim slojevima a najmanja u srednjem sloju. Gustina filma kao celine se zbog ovoga ne može odrediti, pa smo uveli konvenciju da se aritmetička sredina gustina po slojevima tretira kao gustina filma kao celine.

Pomoću korelacionih funkcija određena je unutrašnja energija filma kao suma srednjih vrednosti hamiltonijana filma po slojevima [11–13]. Specifična toplota filma je mogla biti određena samo za slojeve filma pa je po konvenciji aritmetička sredina specifičnih toplota po slojevima tretirana kao specifična toplota celog filma. Poređenjem ovako definisane specifične toplote filma sa specifičnom toplotom idealne strukture konstatovano je da na niskim temperaturama specifična toplota filma za nekoliko redova veličine manja od spefične toplota idealne strukture, da je u intervalu (80, 97) K nešto viša od specične toplote idealne strukture i da na temperaturama višim od 97 K ponovo postaje niža.

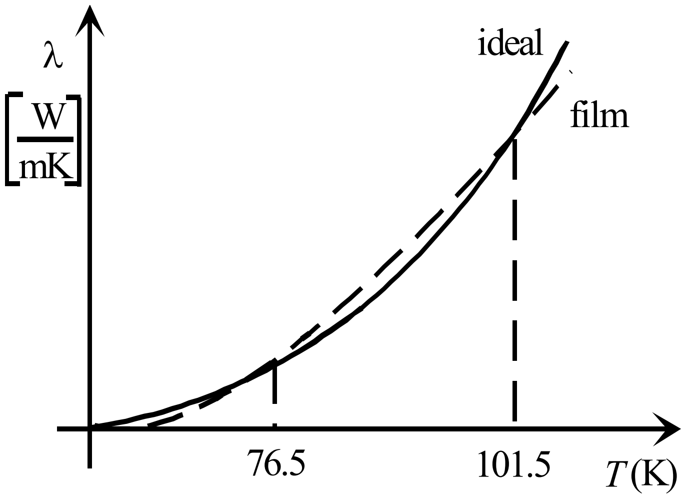
Slično ponašanje ima i koeficijent tolotne provodnosti filma, koji je dat formulom:

$$\lambda = D\cdot C_V\cdot\rho \tag{3.3}$$

gde je D koeficijet difuzije. U odnosu na idealnu strukturu koeficijent toplotne provodnosti se ponaša slično specifičnoj toploti, što znači da je na niskim temperaturama za nekoliko redova veličine manji nego koeficijent toplotne provodnosti idealne strukture, da u intervalu temperatura (76,5 , 101,5) K neznato veći i da je na temperaturama višim od 101,5 K ponovo manji od koeficijenta toplotne provodnosti idealne strukture. Na slikama 1 i 2 grafički su predstavljene zavisnosti specifične toplote i koeficijenta toplotne provodnosti od temperature respektivno za film i idealnu strukturu.



Slika 1: *Specifična toplota*



Slika 2: *Koeficijent toplotne provodnosti*

Opšti zaključak koji sledi iz poređenja specifične toplote i koeficijenta toplotne provodnosti za film i idealnu strukturu je da film ima visoka termoizolaciona svojstva, jer mu je koeficijent toplotne provodnosti znatno manji od odgovarajuće karakteristike idealne strukture, sa izuzetkom intervala $T \in (76{,}5;101{,}2)$ na slici 2. Ovo je naročito bitno za temperature preko 100K.

Na kraju ćemo odrediti tenzor difuzije fonona koji se na osnovu [14] određuje formulom

$$D_{\vec{n}\vec{m}} = \left| lim_{\varepsilon\to 0} \int_0^\infty dte^{-\varepsilon t} \frac{< p_{\vec{m}}(0) p_{\vec{n}}(t) >}{M^2} \right| \qquad (3.4)$$

Koristeći korelacionu funkciju dobijenu iz Grinove funkcije tipa impuls-impuls nalazimo da je tenzor difuzije fonona dijagonalan i da su mu svi dijagonalni elementi jednaki. Dobijena formula za tenzor difuzije je:

$$D_{n_x,n_y,n_z;m_x,m_y,m_z} = \frac{\hbar}{2M} \delta_{n_x,m_x} \delta_{n_y,m_y} \delta_{n_z,m_z} \qquad (3.5)$$

Kao što se vidi vrednost dijagonalog elementa u (3.5) $D = \frac{\hbar}{2M}$, koji predstavlja koeficijent difuzije, ne zavisi ni od temperature ni od koordinata.

4. ZAKLJUČAK

Rezultati ovde izložene analize dinamičkih i termodinamičkih osobina tankog filma mogu se rezimirati sledećim iskazom: U odnosu na idealnu strukturu, ultratanki film ima znatno bolja superprovodna, termoizolaciona i akustičko-izolaciona svojstva.

LITERATURA

[1] D. Popov, S.K. Jaćimovski, B.S. Tošić, J.P. Šetrajčić, Physica A vol.317, 129-139 (2003).

[2] B.S. Tošić, J.P.Šetrajčić, D.Lj. Mirjanić, Z.V. Bundalo, Physica A vol.184, 354-366 (1992).

[3] S.G. Davison and M. Steslicka: Basic Theory of Surface States, Clarendon , Osford (1996).

[4] M. Prutton: Introduction to Surface Physics, Clarendon, Oxfod (1995).

[5] M. Tkach, V. Holovatsky, O. Voitsekhivska, Physica E vol.11, 17-26 (2001).

[6] V.M. Golovach, G.G. Zegrya, A.M. Makhanets, I.V. Pronishin, N.V. Tkach, Semiconductors, vol.33/5, 564-568 (1999).

[7] J.M.Wesselinowa, Phys.Stat.Sol. (b), vol.223, 737 (2001).

[8] J.M.Wesselinowa, Phys.Stat.Sol. (b), vol.229, 1329 (2002).

[9] B.S. Tošić: Statisticka fizika, PMF, Novi Sad (1978).

[10] S. Doniach, E.H. Sondheimer: Green's Functions for Solid State Physisists, Imperial College Press, London (1999).

[11] C. Kittel, Introduction to Solid State Physics, Wiley, New York (1986).

[12] H. Ibach, H. Lüth, Solid–State Physis, An Introduction to Principles of Material Science 3rd edition, Springer, Berlin/Heidelberg/New York (2003).

[13] G. Strobl, Condensed Matter Physics, Crystals, Liquid Crystals and Polymers, Springer, Berlin/Heidelberg/New York (2004).

[14] V.M. Agranovich and M.D. Galanin: Migration of Electron Energy Excitations in Condensed Matter, Nauka, Moscow (1978).

Abstract – Green's functions of the type displacement-displacement and momentum-momentum of utrathin film are found. Due to the broken symmetry in film its physical characteristics are dependent of spatial index in broken symmetry direction. It was concluded that exciting of mechanical oscillations in thin films requires excitations energy which encreases with the decrease of film thickness. The film density, specific heat, thermoconductivity coefficient and diffusion coefficient are analysed, too. It was found that in three layer film with Debye's temperature of the order 200K, phonon excitation energy is of the order $100k_B$. At low temperatures specific heat and thermal conductivity coefficient of the film are for several order of magnitude less than in corresponding ideal structure. Phonon diffusion coefficient does not depend on temperature nor on spacial coordinate.

DINAMICAL AND THERMODYNAMICAL SPECIFICITY OF MECHANICAL OSCILLATIONS IN ULTRATHIN FILMS

Vjekoslav Sajfert, Jovan Šetrajčić,
Dušan Popov, Bratislav Tošić