

Energetska stanja elektrona u ultratankim kristalnim filmovima

Apstrakt

U radu je određen zakon disperzije elektrona u ultratankim film-strukturama metodom dvovremenskih temperaturno zavisnih Grinovih funkcija. Za razliku od neograničenih struktura, energetski spektri elektrona u filmu imaju procep, a zona energija elektrona je uža i strogo diskretna. Veličina procepa i širina zone zavise od debljine filma i brzo se povećavaju sa smanjenjem njene veličine. Ovi rezultati nam obećavaju realan iskorak u nanoelektronici.

Ključne reči

Elektroni, Grinove funkcije, energetska stanja, kristali, ultratanki film

Energy States of Electrons in Ultrathin Crystalline Films

Abstract

The dispersion law of electrons in ultrathin film-structures by the method of two-time temperature dependent Green's functions was done. In variance from unbounded structures, the electron energy spectra in film possesses the gap and the zone of electron energies is narrower and strictly discrete. The magnitude of gap and the zone width depend on film thickness and increase rapidly as its size decreases. These results promise us a real step forward in nanoelectronics.

Keywords

Electrons, Green's functions, energy states, crystals, ultrathin film

1. Uvod – formulacija problema

U teoriji kondenzovane materije najčešće se analiziraju prostorno homogene strukture koje poseduju svojstvo translacione invarijantnosti [1-4]. Međutim, idealne strukture u praksi ne postoje. Osim toga, kristali imaju granične površine na kojima se javljaju specifični efekti i fizičke pojave koje se ne mogu objasniti metodama teorije idealnih struktura. Postojanje graničnih površina, kao i uticaj nečistoća (defekti, praznine i sl.) narušavaju translacionu simetriju u ovim strukturama. U nekim našim novijim radovima [5-10] ispitivali smo uticaj fononskog i eksitonskog podsistema na fizičke karakteristike prostorno jako ograničenih kristalnih struktura, ali ispitivanja sledećeg fundamentalnog podsistema – elektrona ili šupljina

(slobodnih nosilaca naelektrisanja – u našem daljem predstavljanju, govorićemo jednostavno elektroni), od velikog je značaja, jer su oni sami u osnovi svih fizičkih transportnih fizičkih procesa [8,11].

U ovom radu predstavljamo rezultate istraživanja ponašanja elektrona u „idealnom“ ultratankom filmu kubne kristalne strukture, nanesenom na podlogu određenim tehnološkim procesom (dopiranjem, isparavanjem, raspršivanjem,...).

Posmatrani film je ograničen sa dve granične ravni (površ) paralelne sa ravnima (za $z = 0$ i $z = L$). Počevši od standardnog „bulk“ elektronskog hamiltonijana [11]:

$$H = \sum_{\vec{n}} \Delta_{\vec{n}} a_{\vec{n}}^+ a_{\vec{n}} - \sum_{\vec{n}, \vec{m}} W_{\vec{n}, \vec{m}} a_{\vec{n}}^+ a_{\vec{m}} \quad (1)$$

i uzimajući u obzir moguće vrednosti indeksa rešetke: $n_z = 0, 1, 2, \dots, N_z$, gde je $N_z \in [2, 10]$ i $n_\alpha \in \left[-\frac{N_\alpha}{2}, \frac{N_\alpha}{2}\right]$, $N_\alpha \propto 10^8$, $\alpha = x, y$, kao i promenjeni uslovi na granicama filma:

$$\Delta_{n_x n_y 0} = \Delta_{n_x n_y N_z} \equiv \Delta(1 + \varepsilon),$$

ovde je Δ – elektronska energija na čvoru rešetke neograničenog kristala, a površinski parametar ε izražava relativnu promenu te energije na graničnim površima filma),

$$W_{n_x n_y 0; n_x n_y 1} = W_{n_x n_y N_z - 1; n_x n_y N_z} = W(1 + w);$$

$$W_{n_x n_y 0; n_x n_y -1} = W_{n_x n_y N_z; n_x n_y N_z + 1} = 0;$$

$$W_{n_x n_y n_z; n_x \pm 1, n_y n_z} = W_{n_x n_y n_z; n_x n_y \pm 1, n_z} \equiv W$$

matrični elementi preskoka elektrona između najbližih slojeva, a w izražava relativnu promenu elemenata ovih matričnih elemenata u graničnim slojevima filma.

Elektronski hamiltonijan posmatranog modela kristalog filma u aproksimaciju najbližih suseda može se onda napisati u sledećem obliku:

$$\begin{aligned} H = & \sum_{m_x m_y m_z=1}^{N_z-1} a_{m_x m_y m_z}^+ \left[\Delta a_{m_x m_y m_z} - W \left(a_{m_x+1, m_y m_z} + a_{m_x-1, m_y m_z} + \right. \right. \\ & \left. \left. + a_{m_x m_y+1, m_z} + a_{m_x m_y-1, m_z} + a_{m_x m_y m_z+1} + a_{m_x m_y m_z-1} \right) \right] + \\ & + \sum_{m_x m_y} \left\{ a_{m_x m_y 0}^+ \left[(1 + \varepsilon) \Delta a_{m_x m_y 0} - W(1 + w) a_{m_x m_y 1} \right] + \right. \\ & \left. + a_{m_x m_y N_z}^+ \left[(1 + \varepsilon) \Delta a_{m_x m_y N_z} - W(1 + w) a_{m_x m_y N_z-1} \right] - \right. \\ & \left. - W a_{m_x m_y 0}^+ \left(a_{m_x+1, m_y 0} + a_{m_x-1, m_y 0} + a_{m_x m_y+1, 0} + a_{m_x m_y-1, 0} \right) - \right. \\ & \left. - W a_{m_x m_y N_z}^+ \left(a_{m_x+1, m_y N_z} + a_{m_x-1, m_y N_z} + a_{m_x m_y+1, N_z} + a_{m_x m_y-1, N_z} \right) \right\}. \end{aligned} \quad (2)$$

Koristeći ovako definisan izraz (u konfiguracionom prostoru!), možemo izračunati neke fizičke veličine bilo kojim od dobro poznatih kvantnomehaničkih metoda.

2. Elektronske Grinove funkcije

Za navedenu analizu odabrali smo metod Grinovih funkcija, jer nam on omogućava da uspešno tretiramo problem [4,12]. Elektronske jednočestične dvovremenske antikomutatorske

Grinove funkcije:

$$G_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z}(t) = \Theta(t) \left\langle \left\{ a_{n_x n_y n_z}(t), a_{m_x m_y m_z}^+(0) \right\} \right\rangle, \quad (3)$$

ćemo računati standardnom procedurom [12], tj. traženjem izvoda po vremenu levog i desnog izraza i korišćenjem Hajzenbergove jednačine kretanja za anihilacione elektronske operatore $a_{n_x n_y n_z}$:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} G_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z}(t) &= i\hbar \delta(t) \delta_{n_x n_y n_z; m_x m_y m_z} + \\ &+ \Theta(t) \left\langle \left\{ \left[a_{n_x n_y n_z}(t), H \right], a_{m_x m_y m_z}^+(0) \right\} \right\rangle. \end{aligned} \quad (4)$$

Izračunavajući odgovarajuće komutatore i primenjujući parcijalne prostorne i vremenske Furijeove transformacije za Grinovu funkciju, poslednja jednačina se eksplicitno prikazuje kao sistem od $N_z + 1$ nehomogenih diferencnih jednačina:

$$\begin{aligned} (\rho - \varepsilon)G_0 + (1 + w)G_1 &= K_0 \\ (1 + w)G_0 + \rho G_1 + G_2 &= K_1 \\ G_1 + \rho G_2 + G_3 &= K_2 \\ \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot &\quad \cdot \\ G_{n_z-1} + \rho G_{n_z} + G_{n_z+1} &= K_{n_z} \\ \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot &\quad \cdot \\ G_{N_z-3} + \rho G_{N_z-2} + G_{N_z-1} &= K_{N_z-2} \\ G_{N_z-2} + \rho G_{N_z-1} + (1 + w)G_{N_z} &= K_{N_z-1} \\ (1 + w)G_{N_z-1} + (\rho - \varepsilon)G_{N_z} &= K_{N_z} \end{aligned} \quad (5)$$

gde su:

$$\begin{aligned} G_{n_z} &\equiv G_{n_z; m_z}(k_x, k_y; \omega); K_{n_z} \equiv \frac{i\hbar}{2\pi W} \delta_{n_z, m_z} \\ \rho &= \hbar \frac{\omega}{W} - \frac{\Delta}{W} + 2(\cos ak_x + \cos ak_y) \end{aligned} \quad (6)$$

Određivanje polova Grinove funkcije svodi se na nalaženje korena determinante sistema jednačina (5):

$$\begin{aligned} D_{N_z+1}(\rho) &= [\rho(\rho - \varepsilon)^2 + 2(1 + w)^2(\rho - \varepsilon)(1 - \rho^2) + (1 + w)^4 \rho(\rho^2 - 2)]C_{N_z}(\rho) - \\ &- \{[(\rho - \varepsilon) - \rho(1 + w)^2]^2 - (1 + w)^4\}C_{N_z+1}(\rho) \equiv 0, \end{aligned} \quad (7)$$

C_N su karakteristični polinomi Čebiševa druge klase: $C_{N-1} = \rho C_N - C_{N+1}$.

3. Energetski spektar elektrona

Generalno, uslov (7) nije analitički rešiv, ali se može rešiti numerički za date parametre ε, w i N_z . U slučaju kada su $\varepsilon = w = 0$, što odgovara "isečenosti" film-strukture od neogranične (balk-strukture), analitičko rešenje se svodi na:

$$\rho_\mu = 2 \cos \frac{\pi \mu}{N_z + 2}; \quad \mu = 1, 2, 3, \dots, N_z + 1.$$

Smenom: $\nu = N_z + 2 - \mu$, te pomoću (6), zakon disperzije elektrona se dobija u obliku:

$$E_{\vec{k}}(\nu) = 4W \left[\sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y}{2} + \sin^2 \frac{ak_z(\nu)}{2} \right] \quad (8)$$

Ovaj izraz ima isti oblik kao i za spektre elektrona u balk-strukturama, sa jednom suštinskom razlikom: u balku je k_z praktično kontinualna promenljiva (u intervalu $[0, \pi/a]$) kao k_x i k_y , ali ovde u filmu je strogo diskretna – definisana izrazom $k_z(\nu) = \frac{\pi}{a} \frac{\nu}{N_z + 2}$, gde je

$\nu = 1, 2, 3, \dots, N_z + 1$. Pored ovoga, treba primetiti da je:

$$\begin{aligned} k_x^{\min} = k_y^{\min} = 0; \quad k_z^{\min} = \frac{\pi}{a} \frac{1}{N_z + 2} > 0; \\ k_x^{\max} = k_y^{\max} = \frac{\pi}{a}; \quad k_z^{\max} = \frac{\pi}{a} \frac{N_z + 1}{N_z + 2} < \frac{\pi}{a} \end{aligned} \quad (9)$$

za ultratanki film, gde je: $N_z \ll (N_x, N_y)$. Između minimalne i maksimalne vrednosti k_z , a i za $E(\vec{k})$, takođe, u filmu postoji samo $N_z - 1$ diskretnih vrednosti.

Prema gore pomenutim istraživanjima, dolazimo do zaključka da elektronski spektri u ultratankim kristalnim filmovima poseduju dva značajna energetska procepa ili gepa (donji g i gornji f):

$$\begin{aligned} g = E_f^{\min} - E_b^{\min} &\equiv W \left(\frac{\pi}{N_z + 2} \right)^2; \\ f = E_b^{\max} - E_f^{\max} &\equiv 2W \left(\frac{\pi}{N_z + 2} \right)^2 \end{aligned} \quad (10)$$

(indeks f označava film, a b balk strukturu). U termodinamičkom limesu, kada $N_z \rightarrow \infty$, lako je pokazati da: $k_z^{\min} \rightarrow 0$, $k_z^{\max} \rightarrow \pi/a$, $(g; f) \rightarrow 0$, koje potpuno odgovaraju balkovskim vrednostima istih veličina.

4. Concluding Remarks

Rezultati ove analize potvrđuju suštinske razlike u zakonu disperzije elektrona u filmskim strukturama u poređenju sa neograničenim – balk-strukturama, što je isključiva posledica postojanja i uticaja bliskih granica.

Spektri elektrona poseduju značajan energetski gep u filmu, u balku je zanemarljivo mali.

Za razliku od zone dozvoljenih energija u neograničenim strukturama sa praktično kontinualnim variablama, zona dozvoljenih energija elektrona u filmu je uža, njena širina je $3g$ i diskretna je.

Veličina gepa zavisi od debljine filma i brzo se smanjuje sa njegovim povećanjem. Ista zavisnost i isto ponašanje javlja se kod broja diskretnih stanja unutar zone dozvoljenih energija u filmu.

Postojanje donjeg energetskog gepa moglo bi se objasniti na sledeći način: on odgovara energiji osnovnog stanja elektronskog sistema i on, u stvari, označava najmanju energiju koju treba

uložiti da bi se elektronski gas formirao u filmu.

S druge strane, ovo bismo mogli objasniti činjenicom da se u film-strukturi Fermijev nivo „diže“ za vrednost (minimalnog) energetskeg gepa. Samo elektroni sa energijama većim od ove minimalne mogu da učestvuju u transportu i drugim zanimljivim fizičkim procesima.

Sve razlike između posmatranih sistema su uočljivije što je film tanji, ali nestaju kada debljina filma teži beskonačnosti.

Ovde je prikazana analiza određenog zakona disperzije elektrona (tj. energetskeg spektra slobodnih nosilaca naelektrisanja) u prostorno simetrično deformisanim strukturama duž jednog pravca (strukture sa narušenom translacionom simetrijom zbog prisustva graničnih površi) u najjednostavnijem slučaju kada je rešenje energetske jednačine analitičko. Naravno, ovaj slučaj sam po sebi ne daje potpun odgovor na ponašanje elektrona u izuzetno malim ograničenim uzorcima, ali može ukazivati na važne pravce i odrednice nastavku istraživanja.

Već na osnovu ovih preliminarnih rezultata, možemo očekivati da će ista i proširena analiza imati primenu u izgradnji novih – nanoelektronskih elemenata.

Zahvalnica

Ovaj rad je finansijski potpomoglo Ministarstvo za nauku, tehnološki razvoj, visoko obrazovanje i informaciono društvo Vlade Republike Srpske (Projekti br. 19.032/961-36/19 i 19.032/961-42/19).

References

- [1] C. Kittel, Introduction to Solid State Physics, *Wiley*, New York 2004.
- [2] P. Hoffmann, Solid State Physics, *Wiley*, New York 2015.
- [3] S.M. Girvin, K. Yang, Modern Condensed Matter Physics, *Cambridge Univ. Press*, Cambridge 2019.
- [4] B.S. Tošić, J.P. Šetrajčić, S.K. Jaćimovski, Metodi teorijske fizike, *Kriminalističko-policijska akademija*, Zemun – Beograd 2018.
- [5] B.S. Tošić, V.D. Sajfert, J.P. Šetrajčić, D. Popov, D. Ćirić, Primena diferencnog računa u analizi nanostruktura, *Vojvođanska akademija nauka i umetnosti*, Novi Sad 2005.
- [6] D. Popov, S.K. Jaćimovski, B.S. Tošić, J.P. Šetrajčić, Kinetics of Thin Films Mechanical Oscillations, *Physica A* **317**, 129-139 (2003).
- [7] V.D. Sajfert, J.P. Šetrajčić, S.K. Jaćimovski, D. Popov, Theoretical Basis for Phonon Engineering of Nanostructures, *Quantum Matter* **6/1**, 18-27 (2017).
- [8] V.D. Sajfert, J.P. Šetrajčić, Application of Green's Functions and Difference Equations in Theoretical Analyses of Nanostructures, In: Monograph Series on the Foundations of Natural Science and Technology, Vol. 15: Topics in Nanoscience, Part I: Basic Views, Complex Nanosystems: Typical Results and Future, Ed. Schomers W., Ch. 7, pp. 311-412, *World Scientific*, Singapore 2022.
- [9] A.J. Šetrajčić-Tomić, D. Rodić, I.J. Šetrajčić, V.D. Sajfert, J.P. Šetrajčić, Basics of Optical Engineering – Analysis of Environmental and Quantum Size Effects on the Optical Characteristics of Molecular Crystalline Nanofilms, *Photonic Nanostruct.* **31**, 115–128 (2018).
- [10] A.J. Šetrajčić-Tomić, M. Vojnović, J.P. Šetrajčić, S.M. Vučenović, N.R. Vojnović, Theoretical Basis of Optical Engineering of Ultrathin Crystalline Film-Structures, *Opt. Quant. Electron.* **52/4**, 251 [1-18] (2020).
- [11] W. Jones and N.H. March, Theoretical Solid State Physics, *Dover Publ.*, New York 1985.
- [12] G. Rickayzen, Green's Functions and Condensed Matter, *Academic Press*, London 1980.