

Fononski spektri polarnih poluprovodničkih materijala

Letnja praksa 2016. godine, Institut za fiziku, Beograd, Laboratorija za primenu računara u nauci.

Student

Željko Arsić, Fizički fakultet Univerziteta u Beogradu.

Mentor

dr Nenad Vukmirović, Institut za fiziku, Laboratorija za primenu računara u nauci.

Sažetak

Postojanje fonona predstavlja važno svojstvo čvrstih materijala koje određuje njihov odziv na mehaničko-električne spoljne uticaje. U ovom radu, dati su modeli za računanje fononskih spektara, a konkretni su proračunati su za silicijum i aluminijum-arsenid. Modeli su dobijeni korišćenjem Born-Van Karmanove metode, uz Born-Openhajmerovu i harmonijsku aproksimaciju. Prednost modela jeste što je, na osnovu vrednosti konstanti sila u relativno malom broju tačaka moguće odrediti fononske spektre u proizvoljnom broju tačaka. Glavna ograničenost modela jesu anharmonijska svojstva. Proračunati rezultati slažu se sa eksperimentalno dobijenim vrednostima.

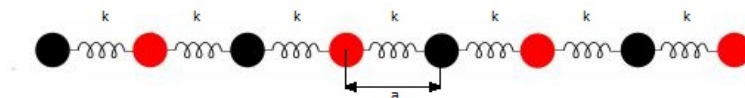
1 Uvod

Materijali se razlikuju po odzivu na različite spoljašnje uticaje. Odzivi se obično karakterišu veličinama koje nazivamo funkcije odziva. Na primer, mera odziva na priključeni električni napon predstavlja otpornost, $R = \frac{dU}{dI}$, dok je mera odziva na predatu količinu toplote toplotni kapacitet, $C = \frac{\delta Q}{dT}$. Ove veličine, kao i mnoge druge, pak, uslovljene su interakcijom čestica unutar sistema, konkretno, kod čvrstih tela, kretanjem i sudarima atoma u kristalnoj rešetki. Kvantna mehanika predviđa, a eksperimenti potvrđuju oscilovanje atoma oko ravnoteznog položaja. Oscilacijama atoma u kristalnoj rešetki pridružujemo virtuelnu česticu, fonon, čija je energija kvantovana. Na osnovu vrednosti energije, kao i interakcije elektron-fonon, mogu se proračunati vrednosti funkcija odziva konkretnog materijala u zavisnosti od parametara sistema. Sve funkcije odziva možemo meriti. Specijalno, na osnovu vrednosti specifične otpornosti, ρ , materijale možemo podeliti na provodnike, poluprovodnike i izolatore.

U ovom radu cilj je izračnati fononske spektre polarnih poluprovodničkih materijala. Želja autora je da tekst bude jasan i razumljiv svima, i da se od jednostavnih modela dođe do složenijih, na osnovu kojih se mogu dobiti konkretni rezultati. Prvi model koji razmatramo (poglavlje dva) jeste beskonačni jednodimenzioni lanac sa dve kuglice različitih masa u jednom periodu. U sledećem poglavlju posmatramo uticaj makroskopskog električnog polja na oscilatore. Ovaj uticaj je bitan kod polarnih materijala, pošto ćemo dugodometne interakcije modelovati na sličan način. U četvrtom poglavlju dat je model proizvoljnog beskonačnog trodimenzionog kristala i određena je njegova dinamička matrica. Jednačine iz poglavlja četiri primenjene su u poglavlju pet i proračunat je fononski spektar silicijuma. U poglavlju šest, model iz četvrtog poglavlja je proširen uračunavanjem dugodometnih interakcija između atoma u rešetki. Na osnovu jednačina iz šestog poglavlja, u sedmom je proračunat fononski spektar aluminijum-arsenida.

2 Longitudinalni i transverzalni fononi u jednodimenzionom lancu sa dve kuglice različitih masa u periodu

Proučavanje fononskih disperzija počecemo jednostavnim modelom 1D lanca, prikazanog na slici 1.



Slika 1: Model 1D kuglica koje osciluju longitudinalno.

Svaka ćelija je dužine a i u njoj se nalaze kuglice masa m_1 i m_2 (dogovorimo se da je m_1 ispred m_2 u datoj ćeliji), obojene crnom i crvenom bojom, redom, povezane oprugom konstante elastičnosti k . Neka su v_n i u_n položaji kuglica mase m_1 i m_2 , redom, u n -toj ćeliji. Posmatrajmo prvo longitudinalni talas. Sa slike 1 i iz Njutnovih zakona kretanja, dobijamo jednačine kretanja kuglica :

$$m_1 \frac{d^2 v_n}{dt^2} = k(u_n - v_n) - k(v_n - u_{n-1}) = k(u_n + u_{n-1} - 2v_n) \quad (1)$$

$$m_2 \frac{d^2 u_n}{dt^2} = k(v_{n+1} - u_n) - k(u_n - v_n) = k(v_{n+1} + v_n - 2u_n) \quad (2)$$

Rešenja sistema (1)-(2) tražimo u obliku :

$$u_n = u_{n0} e^{i(qna - \omega t)}, v_n = v_{n0} e^{i(qna - \omega t)} \quad (3)$$

gde je q talasni vektor. Iz jednačina (3) možemo dobiti vezu između odgovarajućih pomeraja i ubrzanja :

$$\frac{d^2 u_n}{dt^2} = -\omega^2 u_n, \frac{d^2 v_n}{dt^2} = -\omega^2 v_n \quad (4)$$

smenom :

$$\vec{r} = \begin{bmatrix} \sqrt{m_1} v_{n0} \\ \sqrt{m_2} u_{n0} \end{bmatrix} \quad (5)$$

dobijamo jednačine kretanja u obliku :

$$\begin{bmatrix} \frac{2k}{m_1} & \frac{k}{\sqrt{m_1 m_2}} (1 + e^{-iqa}) \\ \frac{k}{\sqrt{m_1 m_2}} (1 + e^{iqa}) & \frac{2k}{m_2} \end{bmatrix} \vec{r} = \omega^2 \vec{r} \quad (6)$$

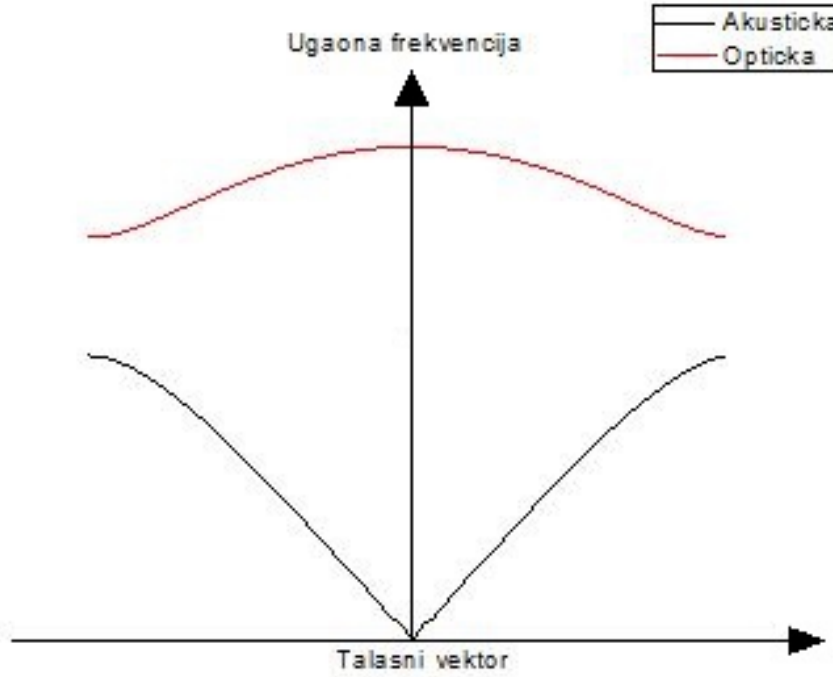
Jednačina (6) predstavlja svojstveni problem. Matrica na njenoj levoj strani je tzv. dinamička matrica. Koreni njenih svojstvenih vrednosti su ugaone frekvencije oscilovanja kuglica. Rešavanjem svojstvenog problema dobijamo sledeću zavisnost ugaone frekvencije oscilovanja od talasnog vektora :

$$\omega^2 = \frac{k}{\mu_r} (1 \pm \sqrt{1 - \frac{4\mu_r^2}{m_1 m_2} \sin^2 \frac{qa}{2}}) \quad (7)$$

Ova zavisnost predstavlja fononski spektar. Primer fononskog spektra 1D lanca je dat na slici 2. Nalaženjem netrivialnih rešenja jednačine (6) pokazuje se da nižoj frekvenciji oscilovanja odgovara kretanje kuglica istog perioda u istom smeru, a višoj kretanje u suprotnim smerovima. Samim tim prvi fonon ne stvara makroskopsko električno polje, pa ne interaguje sa elektromagnetnim talasima. Oscilovanje kuglica je slično oscilovanju sredine kroz koju se prostire mehanički talas, pa se stoga ova moda naziva akustička. Sa druge strane, pri oscilovanju na višoj frekvenciji stvara se makroskopsko električno polje, pa kuglice mogu da interaguju sa elektromagnetnim talasima. Zbog toga se ova moda naziva optička.

Izvedimo sada frekvence transverzalnih optičkih (TO) i akustičkih (TA) fonona. Posmatrajmo sliku 3.

Neka u ravnotežnom položaju kuglica (crna mase m_1 , crvena mase m_2) opruga dužine l'_0 , a dužina neistegnute opruge l''_0 . Jednačine kretanja kuglica u n -tom periodu, sa istim



Slika 2: Grafik zavisnosti ugaone frekvencije od talasnog vektora. Crvenom bojom označen je optički fonon (LO), a crnom akustički (LA)



Slika 3: Model 1D kuglica koje osciluju transverzalno.

oznakama kao u prethodnom primeru, uz aproksimaciju $v_n - u_j \ll l_0''$, $n-1 \leq j \leq n+1$, su :

$$m_1 \frac{d^2 v_n}{dt^2} = k \left(1 - \frac{l_0'}{l_0''}\right) (u_n + u_{n-1} - 2v_n) \quad (8)$$

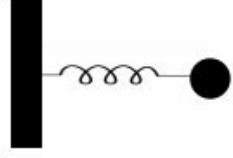
$$m_2 \frac{d^2 u_n}{dt^2} = k \left(1 - \frac{l_0'}{l_0''}\right) (v_{n+1} + v_n - 2u_n) \quad (9)$$

Sistem (8)-(9) ima slična rešenja kao jednačina (5). Da je ovakav odvojeni postupak opravdan može se pokazati, na primer, nalaženjem Lagranževe funkcije n -tog perioda i rešavanjem Lagranževih jednačina iz kojih, uz iste aproksimacije, dobijamo jednačine (1),(2),(8) i (9).

3 Veza između TO i LO fonona u jednostavnom modelu nezavisnih oscilatora

Kao što smo već zaključili, optički fononi interaguju sa elektromagnetnim talasima. U ovom odeljku pokazaćemo da su frekvencije LO i TO fonona vezane relacijom (22).

Neka je naš materijal sastavljen od ravnomerno raspoređenih oscilatora sa slike 4, čija je zapreminska gustina ν . Masa oscilatora je m , naelektrisanje Q a ugaona frekvencija ω_T .



Slika 4: Model nezavisnog oscilatora.

Posmatrajmo njihov odziv na električno polje koje se prostire po zakonu:

$$\vec{E} = \vec{E}_0 e^{i(\vec{q} \cdot \vec{r} - \omega t)} \quad (10)$$

Jednačina kretanja kuglice je :

$$m \frac{d^2 \vec{u}}{dt^2} = -m\omega_T^2 \vec{u} + Q\vec{E} \quad (11)$$

Čije je rešenje :

$$\vec{u} = \vec{u}_0 e^{i(\vec{q} \cdot \vec{r} - \omega t)} \quad (12)$$

Pri čemu je :

$$\vec{u}_0 = \frac{Q\vec{E}_0}{m(\omega_T^2 - \omega^2)} \quad (13)$$

Kako su kuglice naelektrisane i pomaknute iz ravnotežnog položaja za \vec{u} , javlja se makroskopska polarizacija :

$$\vec{P} = \frac{\sum \Delta V \vec{p}}{\Delta V} = \nu Q \vec{u} \quad (14)$$

Vektor električne indukcije je :

$$\vec{D} = \epsilon_0 \epsilon \vec{E} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P} \quad (15)$$

Kombinujući jednačine (15)-(17) dobijamo :

$$\epsilon(\omega) = 1 + \frac{\nu Q^2}{\epsilon_0 m(\omega_T^2 - \omega^2)} \quad (16)$$

Naš model ne uračunava doprinos valentnih elektrona na vrednost dielektrične konstante, pa ćemo (18) modifikovati tako da bolje opisuje realnu situaciju. Pretpostavimo

da ne dolazi do nikakvih pobuđivanja, odnosno $\hbar\omega \ll E_g$. Za elektrone ovo polje je statično, pa je njihov doprinos $\epsilon_e(0)$. Sa druge strane, za $\omega \gg \omega_T$, oscilatori ne mogu da prate električno polje, pa $\epsilon_l \rightarrow 1$. Tada je ϵ približno jednako $\epsilon_e(0)$. Uobičajeno je da se ova vrednost označava sa ϵ_∞ , pa (18) možemo modifikovati u :

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_\infty + \frac{\nu Q^2}{\epsilon_0 m (\omega_T^2 - \omega^2)} \quad (17)$$

Za materijalne sredine važi Gausov zakon :

$$\text{div} \vec{D} = 0 \leftrightarrow \epsilon(\omega)(\vec{q} \circ \vec{E}) = 0 \quad (18)$$

Jednačina (20) ima dva rešenja :

1. $\vec{q} \circ \vec{E} = 0$ - Transverzalni talas,

2. $\epsilon = 0$ - Longitudinalni talas

Longitudinalni talas javlja se pri frekvenciji ω_L za koju je $\epsilon(\omega_L) = 0$, tj :

$$\omega_L^2 = \omega_T^2 + \frac{\nu Q^2}{\epsilon_0 \epsilon_\infty m} \quad (19)$$

4 Fononske disperzije trodimenzionog kristala sa kratko-dometnim interakcijama između atoma

Hamiltonijan koji opisuje idealne kristale je :

$$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} + \sum_i \frac{P_i^2}{2M_i} + \frac{1}{2} \sum_{j,j'}' \frac{Z_j Z_{j'} e^2}{4\pi\epsilon_0 ||R_j - R_{j'}||} - \sum_{i,j} \frac{Z_j e^2}{4\pi\epsilon_0 ||r_i - R_j||} + \frac{1}{2} \sum_{i,i'}' \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 ||r_i - r_{i'}||} \quad (20)$$

On se sastoji iz kinetičke energija elektrona i jezgra i potencijalne energije interakcija jezgro-jezgro, jezgro-elektron i elektron-elektron, sumirano po svim jezgrima i elektronima. Oznaka \sum' označava da se sumiranje ne vrši po istim indeksima. Jasno je da je, zbog velikog broja čestica, ovaj Hamiltonijan veoma teško izračunati. Zato je potrebno izvršiti određene aproksimacije. Prva aproksimacija je razdvajanje „unutrašnjih” i valentnih elektrona, zbog velike razlike u privlačnim silama jezgra koje deluju na njih. Sledeća je Born-Openhajmerova ili adijabatska aproksimacija. Naime, joni (jezgro i unutrašnji elektroni) su mnogo teži od valentnih elektrona, pa se, samim tim, krecu mnogo sporije, praktično stacionarno za elektrone. Joni osećaju dejstvo srednjeg vremenskog potencijala elektrona. Sada, Hamiltonijan (22) možemo napisati u obliku.

$$H = H_{ion}(R_j) + H_e(r_i, R_{j0}) + H_{e-ion}(r_i, \delta R_j) \quad (21)$$

H_{ion} opisuje kretanje jezgra, H_e kretanje elektrona a H_{e-ion} interakciju elektron-fonon. H_{ion} je određen izrazom :

$$H_{ion} = \sum_i \frac{P_i^2}{2M_i} + \frac{1}{2} \sum_{j,j'}' \frac{Z_j Z_{j'} e^2}{4\pi\epsilon_0 ||R_j - R_{j'}||} - \sum_{i,j} \frac{Z_j e^2}{4\pi\epsilon_0 ||r_i - R_j||}$$

$$= \sum \frac{P_i^2}{2M_i} + U(R_{11}, ..., R_{Nn}) \quad (22)$$

Postoje različiti modeli za racunanje $U(\vec{r}_{11}, ..., \vec{r}_{Nn})$, u okviru teorije funkcionala gustine. U ovom radu korišćen je Born-van Karmanov metod konstanti sila.

Neka je položaj j -tog atoma i -te ćelije :

$$\vec{r}_{ij} = \vec{R}_i + \vec{r}_j \quad (23)$$

gde su \vec{R}_i vektor položaja i -te ćelije, a \vec{r}_j vektor položaja j -tog atoma u proizvoljnoj ćeliji. Njega ćemo razdvojiti na ravnotežni položaj i elongaciju usled interakcije sa ostatkom kristala :

$$\vec{r}_{ij} = \vec{r}_{ij}^0 + \vec{u}_{ij} \quad (24)$$

$U(\vec{r}_{11}, ..., \vec{r}_{Nn})$ možemo razviti u red u okolini ravnotežnih položaja, pri čemu ćemo napraviti harmonijsku aproksimaciju, pošto nas ne interesuju anharmonijska svojstva kristala.

$$U(\vec{r}_{11}, ..., \vec{r}_{Nn}) = U_0 + \sum_{i,j,k} \frac{\partial U}{\partial r_{ijk}} \Big|_{r_{ijk}=r_{ijk}^0} u_{ijk} +$$

$$\frac{1}{2} \sum_{i_1,j_1,k_1} \sum_{i_2,j_2,k_2} \frac{\partial^2 U}{\partial r_{i_1,j_1,k_1} \partial r_{i_2,j_2,k_2}} \Big|_{(r_{i_1,j_1,k_1}=r_{i_1,j_1,k_1}^0, r_{i_2,j_2,k_2}=r_{i_2,j_2,k_2}^0)} u_{i_1,j_1,k_1} u_{i_2,j_2,k_2} \quad (25)$$

Koeficijent i označava rešetku, j atom u rešeci, a k pravac x, y ili z . Članovi $\frac{\partial U}{\partial r_{ijk}}$ su jednaki 0, pošto se atomi nalaze ravnotežnom položaju. Konačno, izraz za $U(\vec{r}_{11}, ..., \vec{r}_{Nn})$ postaje :

$$U(\vec{r}_{11}, ..., \vec{r}_{Nn}) = U_0 + \frac{1}{2} \sum_{i_1,j_1,k_1} \sum_{i_2,j_2,k_2} \frac{\partial^2 U}{\partial r_{i_1,j_1,k_1} \partial r_{i_2,j_2,k_2}} \Big|_{r_{i_1,j_1,k_1}=r_{i_1,j_1,k_1}^0, r_{i_2,j_2,k_2}=r_{i_2,j_2,k_2}^0} u_{i_1,j_1,k_1} u_{i_2,j_2,k_2} \quad (26)$$

Konstante $\frac{\partial^2 U}{\partial r_{i_1,j_1,k_1} \partial r_{i_2,j_2,k_2}} \Big|_{r_{i_1,j_1,k_1}=r_{i_1,j_1,k_1}^0, r_{i_2,j_2,k_2}=r_{i_2,j_2,k_2}^0}$ predstavljaju konstante sila.

Pomeraji atoma (ij) iz ravnotežnog položaja mogu se zapisati u obliku :

$$\vec{u}_{ij} = \vec{u}_{j0} e^{i(\vec{q} \circ \vec{R}_i - \omega t)} \quad (27)$$

Zbog simetrije dovoljno je posmatrati proizvoljnu ćeliju, a, jednostavnosti radi, mi ćemo posmatrati nultu, tj onu čiji je $\vec{R} = 0$. Jednačine kretanje b -tog atoma u toj ćeliji su :

$$m_b \frac{d^2 x_b}{dt^2} = - \sum \frac{\partial^2 U}{\partial x_b \partial r_{ijk}} u_{ijk} \quad (28)$$

$$m_b \frac{d^2 y_b}{dt^2} = - \sum \frac{\partial^2 U}{\partial y_b \partial r_{ijk}} u_{ijk} \quad (29)$$

$$m_b \frac{d^2 z_b}{dt^2} = - \sum \frac{\partial^2 U}{\partial z_b \partial r_{ijk}} u_{ijk} \quad (30)$$

Važi :

$$\frac{d^2 \vec{u}_b}{dt^2} = -\omega^2 \vec{u}_b \quad (31)$$

Pa prelaskom na nove koordinate :

$$\vec{r}^T = [\sqrt{m_1} \vec{u}_{10} \quad \sqrt{m_2} \vec{u}_{20} \quad \dots \quad \sqrt{m_n} \vec{u}_{n0}]^T \quad (32)$$

sistem (34)-(36) mozemo zapisati u obliku :

$$(D - \omega^2 I_{3n}) \vec{r} = 0 \quad (33)$$

gde je D dinamička matrica, čiji su elementi :

$$D_{n\alpha, m\beta} = \left(\frac{1}{\sqrt{m_n m_m}} \sum_i \frac{\partial^2 U}{\partial r_{0,n,\alpha} \partial r_{i,m,\beta}} \right) \Big|_{r_{0,n,\alpha} = r_{0,n,\alpha}^0, r_{i,m,\beta} = r_{i,m,\beta}^0} e^{i\vec{q} \circ \vec{R}_i} \quad (34)$$

a ω^2 su njene svojstvene vrednosti. Fononske disperzije, $\omega(\vec{q})$, dobijamo rešavanjem svojstvenog problema (38).

5 Rezultati za silicijum

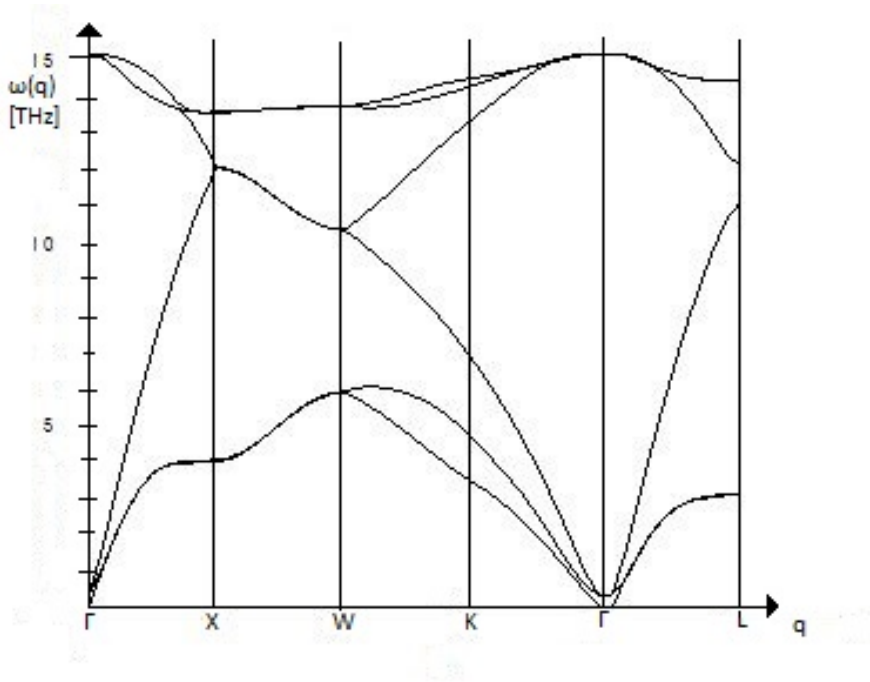
Iz oblika matrice (39) vidimo da je za računanje fononskih spektara nepolarnih materijala potrebno odrediti vrednosti konstanti sila. Njih možemo dobiti interpolacijom. Za talasne vektore u prvoj Brillunovoj zoni i vektore položaja ćelija vazi :

$$\sum_{\vec{q}} e^{i\vec{q} \circ (\vec{R} - \vec{R}')} = N \delta_{\vec{R} \vec{R}'} \quad (35)$$

pa sledi da je konstanta sile $C_{m\alpha, \vec{R}n\beta}$ određena izrazom :

$$C_{m\alpha, \vec{R}n\beta} = \frac{1}{N} \sum_q D_{m\alpha, n\beta}(\vec{q}) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}} \quad (36)$$

Sumiranje vršimo po svim talasnim vektorima u prvoj Brillunovoj zoni. U zavisnosti od toga sa koliko susednih atoma posmatramo interakciju, interpolacija će biti dobra ili lošija. U ovom proračunu, interpolacija je vršena na osnovu vrednosti dinamičke matrice za 512 različitih talasnih vektora. Nakon što su izračunate konstante sila, izračunate su dinamičke matrice za talasne vektore koje se kreću između tačaka simetrije $\Gamma, X, W, K, \Gamma, L$ redom, fononski spektar prikazan je na slici 5.



Slika 5: Fononski spektar silicijuma.

U različitoj literaturi mogu se naći drugačiji prikazi fononskih spektara u zavisnosti od odabranih putanja talasnog vektora. Tačke Γ, X, L i pravci Σ, Δ, Λ poseduju visoku simetriju, te se stoga najčešće sreću u literaturi.

6 Fononske disperzije 3D kristala sa dugodometnim interakcijama između atoma

Dugodometne interakcije polarnih materijala modelovaćemo makroskopskim električnim poljem, posredstvom kojeg se prenosi dugodometna interakcija. Potrebno je odrediti zavisnost električnog polja od položaja atoma u ćelijama. Posmatrajmo proizvoljnu ćeliju. Atomi u njoj imaju efektivni tenzor naelektrisanja Q_j , i pomaknuti su

od ravnotežnog položaja za vektor \vec{u}_j . Na polarizaciju date ćelije utiču kretanja jezgara i valentnih elektrona. Ako je električno polje dato vektorom \vec{E} , polarizacija je :

$$\vec{P} = \frac{1}{\Omega_0} \sum Q_i \vec{u}_i + \epsilon_0(\epsilon_\infty - 1)\vec{E} \quad (37)$$

Iz Gausovog zakona za materijalne sredne (20) dobijamo vezu izmedju \vec{E} i \vec{P} :

$$\vec{E} = -\frac{1}{\epsilon_0} \frac{\vec{q}(\vec{q} \circ \vec{P})}{q^2} \quad (38)$$

Dugodometna sila koja deluje na j -ti atom u ćeliji :

$$\vec{F}_j^{NA} = Q_j \vec{E} \quad (39)$$

Korišćenjem jednačina (42)-(44) dobijamo jednačine kretanja atoma u proizvoljnoj ćeliji :

$$\left(\frac{1}{\sqrt{m_i m_j}} \sum \frac{\partial^2 U}{\partial \alpha_n \partial \beta_m} e^{i\vec{q} \circ \vec{R}_k} + \frac{1}{\epsilon_0 \Omega_0} \sum \frac{1}{\sqrt{m_n m_m}} \frac{(\vec{q} Q_n)_\alpha (\vec{q} Q_m)_\beta}{\vec{q} \epsilon_\infty \vec{q}} \right)_{\alpha n, \beta b}^{(3n \times 3n)} \vec{r} = -\omega^2 \vec{r} \quad (40)$$

Koreni svojstvenih vrednosti ove dinamičke matrice predstavljaju ugaone frekvence oscilovanja atoma u ćeliji.

7 Rezultati za aluminijum-arsenid

Član

$$C_{n\alpha, m\beta}^{NA} = \frac{1}{\epsilon_0 \Omega_0} \left(\sum \frac{1}{\sqrt{m_n m_m}} \frac{(\vec{q} Q_n)_\alpha (\vec{q} Q_m)_\beta}{\vec{q} \epsilon_\infty \vec{q}} \right)_{\alpha i, \beta j}^{(3n \times 3n)} \quad (41)$$

dinamičke matrice (45) se naziva neanalitički član i on predstavlja glavni problem prilikom računanja fononskih spektara polarnih materijala. Ipak, moguće je proračunati Bornov efektivni tenzor naelektrisanja i dielektrični tenzor. Uz pomoc njih, možemo izračunati neanalitički član dinamičke matrice, oduzeti ga od iste, i zatim izvršiti interpolaciju tj. odrediti vrednosti konstanti sila. Kada su one poznate, možemo odrediti dinamičke matrice za proizvoljni talasni vektor, obrnutom Furijeovom transformacijom i dodavanjem neanalitičkog člana. Fononski spektar proračunat za *AlAs* prikazan je na slici 6.

(slika6)

Kristalna rešetka *AlAs* identična je rešeci *Si₂*, pa su fononski spektri proračunati za iste vrednosti talasnog vektora.

8 Zaključak

U ovom radu prikazan je jedan od načina za računanje fononskih spektara proizvoljnih polarnih i nepolarnih materijala, na osnovu parametara sistema koji se mogu proračunati korišćenjem teorije funkcionala gustine. Same krive se u velikoj meri poklapaju sa krivama dobijenim u drugim radovima i knjigama, čija su predviđanja eksperimentalno potvrđena.

9 Zahvalnice

Zahvaljujem dr Nenadu Vukmiroviću na strpljenju i izdvojenom vremenu tokom 3 meseca prakse. Takođe, zahvaljujem Veljku Jankoviću na korisnim savetima iz fizike poluprovodnika, i Dušanu Vudragoviću, Petru Jovanoviću i Vladimiru Slavniću na tehničkoj podršci.

10 Literatura

- [1] Peter Y. Yu, Manuel Cardona - Fundamentals of Semiconductors
- [2] Max Born, Kun Huang - Dynamical Theory of Crystal Lattices
- [3] Christopher Bradley, Arthur Cracknell - The Mathematical Theory of Symmetry in Solids
- [4] W. Cochran, R.A. Cowley, "Dielectric Constants and Lattice Vibrations", jpcs23-447
- [5] Robert M. Pick, Morrel H. Cohen, Richard M. Martina, "Microscopic Theory of Force Constants in the Adiabatic Approximation", PhysRevB.1.910,
- [6] Xavier Gonze, Changyol Lee, "Dynamical matrices, Born effective charges, dielectric permittivity tensors, and interatomic force constants from density-functional perturbation theory", PhysRevB.55.10355
- [7] Xavier Gonze, "First-principles responses of solids to atomic displacements and homogeneous electric fields: Implementation of a conjugate-gradient algorithm", PhysRevB.55.10337
- [8] Paolo Giannozzi, Stefano de Gironcoli, Pasquale Pavone, Stefano Baroni - Ab initio calculation of phonon dispersions in semiconductors, PhysRevB.43.7231
- [9] P. Vogl, "Microscopic theory of electron-phonon interaction in insulators or semiconductors", PhysRevB.13.694.