

Fononska toplotna provodnost tankih kristalnih filmova

STEVO JAČIMOVSKI, Kriminalističko-policijska akademija, Beograd
JOVAN ŠETRAJČIĆ, VOJKAN ZORIĆ,
Departman za fiziku, PMF, Novi Sad
DEJAN RAKOVIĆ, Elektrotehnički Fakultet, Beograd

Originalni naučni rad
UDC: 621.371.8:53.082.4.84

U radu je analizirana fononska toplotna provodnost u kristalnim filmovima, tj. niskodimenzionim strukturama kod kojih su dimenzioni parametri značajno smanjeni samo u jednom pravcu. Određivanje koeficijenta toplotne provodnosti je vršeno određivanjem koeficijenta difuzije fonona, fononske specifične toplote i masene gustine za datu strukturu. Koeficijent difuzije je naen metodom Grinovih funkcija, korišćenjem Kubo formule. Izvršena su poređenja redukovanih toplotnih provodnosti filma i neprekidnih (balk) struktura za širi temperaturski interval. U poslednjem delu je analiziran uticaj promena na granicama na toplotnu provodnost.

Ključne reči: fononi, koeficijent toplotne provodnosti, specifična toplota

1. UVOD

Mehaničke oscilacije su uvek prisutni podsistem, bez obzira da li se analiziraju provodnici, poluprovodnici ili dielektrici. U analizi pojava u tankim filmovima autori polaze od kinetičkih svojstava sistema mehaničkih oscilacija.

Na osnovu opšte formule [1]

$$\kappa = DC\rho_M \quad (1.1)$$

gde je κ koeficijent toplotne provodnosti, D koeficijent difuzije, C specifična toplota filma, a ρ_M masena gustina filma, biće određen koeficijent toplotne provodnosti filma. Izučavanje ove veličine ima veliki praktični interes, jer ovaj koeficijent reguliše toplotnu izolaciju i niz drugih osobina strukture, zavisno od toga da li je ta struktura provodnik, poluprovodnik ili dielektrik.

Koeficijent difuzije D (tačnije tenzor difuzije D_{ij}) biće određen korišćenjem Kubo formule [1, 2]. Radi određivanja temperaturske zavisnosti gustine filma biće korišćen metod Grinovih funkcija za izračunavanje unutrašnje energije i srednjeg kvadrata molekulskih pomeraja.

Svi navedeni proračuni biće izvedeni za idealne uslove na granicama filma i posebne površinske uslove koji se u principu mogu birati sa ciljem da se postigne željeni efekat.

Razume se da je krajnji cilj ovog rada da se odaberu optimalni granični uslovi, zavisno od toga šta se želi postići deformacijim granica.

Adresa autora: Stevo Jačimovski, Kriminalističko-policijska akademija, Beograd, Cara Dušana 196
Rad primljen: 11.08.2011.

2. KOEFICIJENT DIFUZIJE

Pri određivanju koeficijenta difuzije polazimo od Kubo formule [2-3].

$$D_{ij} = \frac{1}{\beta} \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \int_0^\infty dt e^{-\delta t} \int_0^\beta d\lambda \langle \hat{v}_i(-i\hbar\lambda) \hat{v}_j(t) \rangle \quad (2.1)$$

gde su \hat{v}_i i \hat{v}_j operatori brzina, u Hajzenbergovoj reprezentaciji, prostiranja mehaničkih oscilacija duž kristalografskog pravca $i, j \in (x, y, z)$, $\beta = 1/k_B T$, a δ je perturbacioni parametar.

Na osnovu činjenice da je

$$\hbar\beta = \frac{\hbar}{k_B T} = 1$$

formulu (2.1) svodimo na

$$D_{ij} = \lim_{\delta \rightarrow \infty} \int_0^\infty dt e^{-\delta t} \langle \hat{v}_i(0) \hat{v}_j(t) \rangle \quad (2.2)$$

Usrednjavanje se vrši po velikom kanoničkom ansamblu:

$$\langle \dots \rangle = Sp e^{\frac{\Phi + \mu N - H}{\theta}} (\dots) \quad (2.3)$$

gde je: Φ termodinamički potencijal, μ hemijski potencijal, H Hamiltonijan sistema, a $\theta = k_B T = 1/\beta$.

Da bi se odredila korelaciona funkcija $\langle \hat{v}_i \hat{v}_j \rangle$ naći ćemo Grinovu funkciju $\langle \langle p_i(t) | p_j(0) \rangle \rangle$, gde su $p_i(t)$ and $p_j(0)$ komponente impulsa.

Fononski Hamiltonijan sistema ima oblik

$$H = \frac{1}{2M} \sum_{\vec{n}} p_{\vec{n}}^2 + \frac{C_H}{2} \sum_{\vec{n}} (u_{\vec{n}}^2 + u_{\vec{n}-1}^2 - 2u_{\vec{n}}u_{\vec{n}-1}); \quad \vec{n} \in (n_x, n_y, n_z) \quad (2.4)$$

gde su M mase molekula, C_H Hukove konstante istezanja, a u molekulski pomeraji. Treba naglasiti da je navedeni Hamiltonijan idealne strukture, a granični uslovi će biti uzeti u obzir u sistemu jednačina za Grinovu funkciju.

Potražićemo Grinovu funkciju tipa impuls-impuls:

$$\begin{aligned} G_{f_g}(t) &= \langle\langle p_f(t) | p_g(0) \rangle\rangle \\ G_{n_x n_y n_z f; m_x m_y m_z g} &= \\ \langle\langle p_{n_x n_y f}(t) | p_{m_x m_y g}(0) \rangle\rangle & \end{aligned} \quad (2.5)$$

U jednačini za Grinovu funkciju pojavljuje se i Grinova funkcija tipa pomeraj-pomeraj:

$$\langle\langle u_{n_x n_y f}(t) | u_{m_x m_y g}(0) \rangle\rangle$$

Koristeći standardnu proceduru tehnike dvovremenih Grinovih funkcija [4], i transformaciju

$$\begin{aligned} G_{n_x n_y f; m_x m_y g}(t) &= \\ \frac{1}{N_x N_y k_x k_y} \sum_{k_x k_y} G_{k_x k_y f; k_x k_y g}(t) e^{ik_x a(n_x - m_x) + ik_y a(n_y - m_y)} & \end{aligned} \quad (2.6)$$

za Furije lik ove Grinove funkcije

$$G_{k_x k_y f; k_x k_y g}(t) \equiv G_f(t)$$

(drugi indeks se ispušta jer nije od bitne važnosti)

$$G_f(\omega) \equiv \langle\langle p_f | p_f \rangle\rangle_{\omega} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G_f(t) e^{i\omega t} dt \quad (2.7)$$

dobijamo sledeći rezultat:

$$G_{f+1}(\omega) + G_{f-1}(\omega) - \rho G_f(\omega) = \frac{i\hbar M}{\pi} \quad (2.8)$$

gde je

$$\rho = 2 + 4 \left(\sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y}{2} \right) - \frac{M\omega^2}{C_H} \quad (2.9)$$

Na ovom nivou moramo uzeti u obzir da se radi o filmu i da na granicama filma postoje određeni granični uslovi.

Za $f \in (1, \dots, N_z - 1)$ jednačina za Grinovu funkciju je oblika:

$$G_{f+1}(\omega) + G_{f-1}(\omega) - \rho G_f(\omega) = R; \quad R \equiv \frac{i\hbar M}{\pi} \quad (2.10)$$

Za sloj $f=0$ imamo jednačinu

$$G_1(\omega) + (\rho + \rho_0)G_0(\omega) = R, \quad (2.11)$$

gde je ρ_0 popravka veličini ρ na granici $f=0$.

Za sloj $f=N_z$ imamo jednačinu

$$G_{N_z-1}(\omega) + (\rho + \rho_{N_z})G_{N_z}(\omega) = R \quad (2.12)$$

Sistem jednačina (2.10), (2.11) i (2.12) rešavamo smenom

$$G_f(\omega) = A \sin fka + B \sin(f-1)ka; \quad k \equiv k_z \quad (2.13)$$

gde je a konstanta rešetke, k talasni vektor, a A i B konstante koje ćemo odrediti iz graničnih uslova.

Ako se (2.13) uvrsti u sisteme (2.10), (2.11) i (2.12), dobija se:

$$G_f(\omega) = \frac{i\hbar C_H}{\pi} \frac{1}{\omega^2 - \Omega^2}, \quad (2.14)$$

gde je

$$\Omega = 2 \sqrt{\frac{C_H}{M} \sqrt{\sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y}{2} + \sin^2 \frac{ak_z}{2}}}. \quad (2.15)$$

U izrazu (2.15) je:

$$k_x = \frac{2\pi v}{N_x a}; \quad k_y = \frac{2\pi v}{N_y a},$$

dok se $k \equiv k_z$ dobija iz transcendentne jednačine:

$$\cot(N_z - 1)ka = \frac{4 \cos^3 ak - 2(\rho_0 + \rho_N) \cos^2 ak + (\rho_0 \rho_N - 3) \cos ak + \rho_0 \rho_N}{-\sin ak [4 \cos^2 ak + 2(\rho_0 + \rho_N) \cos ak + (1 - \rho_0 \rho_N)]} \quad (2.16)$$

U „cut-off“ slučaju imamo da je:

$$k \equiv k_z = \frac{N\pi}{N+2} \quad (2.17)$$

Vidi se da su nivoi k_x i k_y ekvidistantni, dok nivoi k_z , zbog deformacija strukture, gube ekvidistantnost.

Korelaciona funkcija Grinove funkcije (2.14) računa se po opštoj formuli [4]:

$$\langle p_f(t) p_f(0) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega t} \frac{G_f(\omega + i\delta) - G_f(\omega - i\delta)}{e^{\frac{\hbar\omega}{\theta}} - 1} \quad (2.18)$$

Grinova funkcija (2.14) razbija se na sumu elementarnih razlomaka i posle zamene u (2.18) dobijamo korelacionu funkciju:

$$\langle p_f(t)p_f(0) \rangle = \frac{\hbar C_H}{\Omega} \left(\frac{e^{-i\Omega t}}{e^{\frac{\hbar\omega}{\theta}} - 1} - \frac{e^{i\Omega t}}{e^{\frac{\hbar\omega}{\theta}} - 1} \right), \quad (2.19)$$

odakle sledi:

$$\langle v_f(t)v_f(0) \rangle = \frac{\hbar C_H}{M^2 \Omega} \left(\frac{e^{-i\Omega t}}{e^{\frac{\hbar\omega}{\theta}} - 1} - \frac{e^{i\Omega t}}{e^{\frac{\hbar\omega}{\theta}} - 1} \right). \quad (2.20)$$

Prema opštoj formuli (2.2) koeficijent difuzije $D_{ij} \equiv D$ dat je sa [5]:

$$D = \left| \frac{\hbar C_H}{M^2 \Omega} \int_0^\infty \left(e^{-\delta t} \frac{e^{-i\Omega t}}{e^{\frac{\hbar\omega}{\theta}} - 1} - e^{-\delta t} \frac{e^{i\Omega t}}{e^{\frac{\hbar\omega}{\theta}} - 1} \right) dt \right| = \frac{\hbar C_H}{M^2 \Omega^2}. \quad (2.21)$$

Kao što se vidi, fononski koeficijent difuzije ne zavisi od temperature.

3. SPECIFIČNA TOPLOTA I MASENA GUSTINA

Da bi se izračunala specifična toplota potrebno je naći unutrašnju energiju. Pošto je ova veličina srednja vrednost fononskog Hamiltonijana, treba naći Grinovu funkciju

$$D_{n_x n_y f; m_x m_y g}(t) = \langle\langle u_{n_x n_y f}(t) | u_{m_x m_y g}(0) \rangle\rangle, \quad (3.1)$$

jer je Grinova funkcija

$$G_{n_x n_y f; m_x m_y g}(t) = \langle\langle p_{n_x n_y f} | p_{m_x m_y g} \rangle\rangle \quad (3.2)$$

već nađena.

Koristeći spektralnu intezivnost pomenutih Grinovih funkcija nalazimo srednju vrednost fononskog Hamiltonijana, a specifičnu toplotu dobijamo diferencirajući ovu veličinu po temperaturi.

Pošto je u izrazu za gustinu krucijalna veličina srednja vrednost kvadrata molekuskog pomeraja, poznavanje funkcije (3.1) omogućava da se ova veličina izračuna. Pošto je procedura nalaženja Grinove funkcije fononskog sistema detaljno izložena u prethodnom paragrafu ovde ćemo samo navesti izraze za funkciju D_f , za unutrašnju energiju U_f [6], specifičnu toplotu C_f [6] i srednji kvadrat molekuskog pomeraja $\langle u^2 \rangle$ [7]. Ovi izrazi su:

$$D_f(\omega) = \frac{i\hbar}{4\pi M \Omega} \left(\frac{1}{\omega - \Omega} - \frac{1}{\omega + \Omega} \right) \quad (3.3)$$

$$U_f = \frac{3N_f}{2\pi} \left(\frac{\Delta}{E_0} \right)^2 \theta \left\{ \left[Z_1 \left(\frac{\Delta}{\theta} \right) - \varepsilon^2 Z_1 \left(\varepsilon \frac{\Delta}{\theta} \right) \right] + \right. \\ \left. + \frac{\theta}{\Delta} \left[Z_2 \left(\frac{\Delta}{\theta} \right) - \varepsilon Z_2 \left(\varepsilon \frac{\Delta}{\theta} \right) \right] + 2 \left(\frac{\theta}{\Delta} \right)^2 \left[Z_3 \left(\frac{\Delta}{\theta} \right) - Z_3 \left(\varepsilon \frac{\Delta}{\theta} \right) \right] \right\}, \quad (3.4)$$

gde je :

$$E_D = E_0 a k_{max}; \\ N_f = N_x N_y (N_z + 1); \\ \varepsilon = \sqrt{1 + (E_D / \Delta)^2} \\ k^2 = k_x^2 + k_y^2; \\ \Delta = a k_z^{min} E_0; \\ Z_r(X) = \sum_{j=1}^{\infty} j^{-r} e^{-jX} \quad (3.5)$$

(Z_r su Dajsonove funkcije) i

$$C_f = \frac{3k_B}{2\pi} \left(\frac{\Delta}{E_0} \right)^2 \frac{\Delta}{\theta} \left[(e^{A\theta} - 1)^{-1} - \varepsilon^3 (e^{\varepsilon A\theta} - 1)^{-1} \right] + \\ + 3 \left[Z_1 \left(\frac{\Delta}{\theta} \right) - \varepsilon^2 Z_1 \left(\varepsilon \frac{\Delta}{\theta} \right) \right] + 6 \frac{\theta}{\Delta} \left[Z_2 \left(\frac{\Delta}{\theta} \right) - \varepsilon Z_2 \left(\varepsilon \frac{\Delta}{\theta} \right) \right] + \\ + 6 \left(\frac{\theta}{\Delta} \right)^2 \left[Z_3 \left(\frac{\Delta}{\theta} \right) - Z_3 \left(\varepsilon \frac{\Delta}{\theta} \right) \right] \quad (3.6)$$

U Debajevoj aproksimaciji izraz za kvadrat molekuskog pomeraja je

$$\langle u^2 \rangle - \langle u_0^2 \rangle = \frac{\hbar}{\omega_D} \frac{3k_B}{2\pi} \frac{\Delta}{E_0^2} \theta \left[Z_1 \left(\frac{\Delta}{\theta} \right) - \right. \\ \left. - \varepsilon Z_1 \left(\varepsilon \frac{\Delta}{\theta} \right) \right] + \frac{\theta}{\Delta} \left[Z_2 \left(\frac{\Delta}{\theta} \right) - \varepsilon Z_2 \left(\varepsilon \frac{\Delta}{\theta} \right) \right] \quad (3.7)$$

Na osnovu izraza za masenu gustinu

$$\rho = \frac{M}{\langle a \rangle^3} = \frac{M}{\langle a_0 \rangle^3} \frac{1}{1 + \frac{3\langle u \rangle^2}{\langle a_0 \rangle^2}} \quad (3.8)$$

za $a = a_0 + u$, i izraza (3.7), dobija se približno izraz

$$\rho \approx \rho_0 \left(1 - \frac{3\langle u \rangle^2}{\langle a_0 \rangle^2} \right) \quad (3.9)$$

$$\rho \approx \rho_0 \left\{ 1 - \frac{3}{\langle a_0 \rangle^2} \frac{\hbar}{\omega_D} \frac{3k_B}{2\pi} \frac{\Delta}{E_0^2} \theta \left[Z_1 \left(\frac{\Delta}{\theta} \right) - \varepsilon Z_1 \left(\varepsilon \frac{\Delta}{\theta} \right) \right] + \frac{\theta}{\Delta} \left[Z_2 \left(\frac{\Delta}{\theta} \right) - \varepsilon Z_2 \left(\varepsilon \frac{\Delta}{\theta} \right) \right] \right\} \quad (3.10)$$

gde je uzet izraz za kvadrat molekularnih pomeraja kod filma [7].

Zamenjujući (2.21), (3.6) i (3.10) u (1.1) dobijamo da je fononski koeficijent toplotne provodnosti:

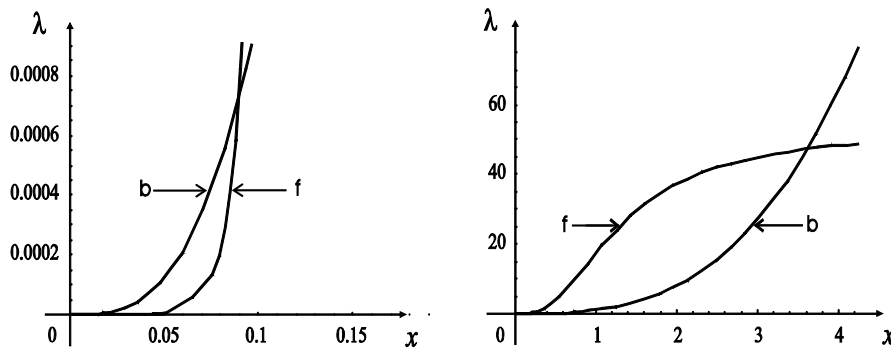
$$\begin{aligned} \kappa = & \frac{\hbar C_H}{M^2 \Omega^2} \frac{3k_B}{2\pi} \left(\frac{\Delta}{E_0}\right)^2 \left\{ \frac{\Delta}{\theta} [(e^{\Delta/\theta} - 1)^{-1} - e^3 (e^{3\Delta/\theta} - 1)^{-1}] + 3[Z_1(\frac{\Delta}{\theta}) - \varepsilon^2 Z_1(\varepsilon \frac{\Delta}{\theta})] + \right. \\ & + 6\frac{\theta}{\Delta} [Z_2(\frac{\Delta}{\theta}) - \varepsilon Z_2(\varepsilon \frac{\Delta}{\theta})] + 6\left(\frac{\theta}{\Delta}\right)^2 [Z_3(\frac{\Delta}{\theta}) - Z_3(\varepsilon \frac{\Delta}{\theta})] \left. \right\} \times \\ & \times \rho_0 \left\{ 1 - \frac{3}{<a_0>} \frac{\hbar}{\omega_D} \frac{3k_B}{2\pi} \frac{\Delta}{E_0^2} \theta [Z_1(\frac{\Delta}{\theta}) - \varepsilon Z_1(\varepsilon \frac{\Delta}{\theta})] + \right. \\ & + \left. \frac{\theta}{\Delta} [Z_2(\frac{\Delta}{\theta}) - \varepsilon Z_2(\varepsilon \frac{\Delta}{\theta})] \right\} \end{aligned} \quad (3.11)$$

Veoma je važno naglasiti da transcendentna jednačina nema rešenje $k=0$, što znači da fononski

spektar ima gep odnosno da je za pobuđenje fonona potrebna aktivaciona energija [5]. Ova formula je analizirana numerički kao funkcija od redukovane (skalirane) temperature $x = \theta/\Delta$. Uvodimo oznaku za redukovani koeficijent toplotne provodnosti:

$$\lambda_{bf}(x) \equiv \frac{\kappa_{bf}(x)}{\kappa_0}; \quad \kappa_0 = \frac{8}{9} (6\pi^2)^{-2/3} \frac{\hbar}{a^3} \left(\frac{\Delta}{E_0}\right)^3 \quad (3.12)$$

Zavisnost redukovane toplotne provodnosti od redukovane temperature je data na slici 1. Sa slike se vidi da je na ekstremno niskim temperaturama $T \leq 4$ K i na temperaturama $T \geq 180$ K, toplotna provodnost filma niža od toplotnih provodnosti masivnih kristala, dok je izmeu ovih temperatura toplotna provodnost masivnih struktura niža nego kod film struktura.



Slika 1 - Redukovani koeficijent toplotne provodnosti filma i balk struktura na ekstremno niskim temperaturama $T < 5$ K (levo) i temperaturama $T > 5$ K (desno)

Na osnovu dobijenih rezultata može se zaključiti da je koeficijent toplotne provodnosti tankih filmova na niskim temperaturama znatno niži od koeficijenta toplotne provodnosti masivnih struktura, jer opada eksponencijalno dok u masivnoj strukturi opada sa T^3 . Ovaj rezultat bi trebalo da nađe neposrednu primenu. Sendvič od nekoliko filmova trebalo bi da obezbeđuje znatno bolju izolaciju nego masivna struktura iste debljine.

4. UTICAJ PROMENA NA GRANICAMA

U ovom delu biće prodiskutovan uticaj uslova na minimum energije toplotnih kvantata pri kojoj su oni sposobni da proizvedu mehaničke oscilacije.

Pretpostavićemo da su uslovi na obe granice $n_z = 0$ i $n_z = N_z$ isti. Takođe ćemo pretpostaviti da se konstante rešetke u graničnim slučajevima ne menjaju, a to znači da se trigonometrijski deo parametra ρ ne menja i da se ne menjaju Hukove konstante C_H . Jedina promena će biti ugrađivanje molekula manje mase u granične slojeve [8]. Ako je masa u idealnom slučaju bila M u navedenom slučaju uvođenje novih molekula u granične površine

menja masu za veličinu M' . tako imamo situaciju gde su na površini molekuli sa masama $M - M'$, a u unutrašnjosti molekuli sa masom M . Ako se navedene korekcije mase uključe u izraz za parametar ρ , onda on na granicama dobija popravku

$$\rho = \rho_0 = \rho_N = \frac{\omega^2}{\Omega^2} \frac{M'}{M}. \quad (4.1)$$

Numeričko rešavanje transcendentne jednačine (2.16) pokazalo je da je za $\rho' = 1$ minimalna vrednost talasnog vektora u pravcu z ose $ak_{min}^z = 1,22$. Ovo je najviša minimalna vrednost k_z koja se može postići promenom graničnih uslova. Za veoma tanke filmove ova vrednost k_z praktično ne zavisi od debljine filma. To znači, s obzirom na (4.1) da je minimalna frekvencija pobuđivanja fonona u ovako deformisanom filmu:

$$\omega_{min} = 2\Omega \sin \frac{1,22}{2}, \quad (4.2)$$

odakle sledi

$$\frac{\omega_{min}}{\Omega} = 1,146. \quad (4.3)$$

Kombinujući (4.2) i (4.3) nalazimo $M'/M = 0,76$ što znači da masa molekula na granicama $M - M'$ treba da bude oko četiri puta manja od mase molekula u unutrašnjosti da bi se pobudili fononi sa frekvencijama iz (4.2). Preciznije

$$M - M' = 0,24 \quad (4.4)$$

Ako se uzme da je Debajeva frekvencija

$$\omega_D = 2\sqrt{3}\Omega = 150 \frac{k_B}{\hbar}$$

na osnovu (4.2) sledi da je minimalna temperatura za pobuđenje fonona u datom slučaju $T \approx 50K$.

Na osnovu ovoga može se zaključiti da izbor graničnih uslova predstavlja jedan od bitnih optimalnih zahteva da se dobiju bolji superprovodni materijali.

Na kraju ovog paragrafa daćemo opštu formulu za popravku parametra ρ na granicama, pri čemu ova opšta formula uključuje i promene konstante rešetke koje se mogu izazvati promenom pritiska na granicama.

Ako su promene konstante rešetke na granicama $a \rightarrow a \mp a'$; $a = a'$ onda i $C_H \rightarrow C_H \pm C_H'$; $C_H = C_H'$. Takođe ćemo uzeti i promene masa $M \rightarrow M \mp M'$. U navedenom slučaju nije teško izračunati da je promena parametra ρ na granicama

$$\rho' = \frac{\omega^2}{\Omega^2} (\mp \frac{M'}{M} \pm \frac{C_H'}{C_H}) \mp 2a'k_x \sin k_x \mp 2a' \sin k_x, \quad (4.5)$$

Ovo je opštija formula i povećava mogućnost manipulisanja na granicama u cilju postizanja optimalnog rezultata.

5. ZAKLJUČAK

Na osnovu dobijenih rezultata može se zaključiti da je koeficijent toplotne provodnosti tankih filmova na niskim temperaturama znatno niži od koeficijenta toplotne provodnosti masivnih struktura, jer on opada eksponencijalno dok u masivnoj strukturi opada sa T^3 . Ovaj rezultat bi trebalo da nae neposrednu primenu. Sendvič od nekoliko filmova trebalo bi da obezbeuje znatno bolju izolaciju nego masivna struktura iste debljine. Rezultati dobijeni u trećem delu su uporeeni sa eksperimentalnim podacima iz referenci [9-13] i konstatovano je dobro kvalitativno slaganje.

Analize izvršene u četvrtom odeljku pokazale su da podesnim izborom graničnih uslova (ugraivanjem lakših molekula u granične slojeve) mogu postići aktivacione temperature od 50 K. Procene koje su vršene u četvrtom paragrafu odnose se na šire zone k_z i na aktivacione temperature reda 20 K, pri čemu je ova procena pravljen za „cut-off” slučaj. Ako se

„preradom” granica postignu više aktivacione temperature i uže zone onda je i toplotna provodljivost znatno manja od vrednosti procenjene u paragrafu 4. Što se tiče električne provodnosti ona bi po Videman-Francovom zakonu trebalo da bude proporcionalna toplotnoj provodnosti. Na osnovu ovoga može se zaključiti da su tanki filmovi slabiji električni provodnici nego masivne strukture od istog materijala. Ovo može da bude značajno za efekat superprovodnosti jer je poznato da su slabiji provodnici bolji superprovodnici.

U računima koji su navedeni nisu uzeti u obzir efekti prebačaja (Umklapp procesi) fizičkih karakteristika pri dodavanju vektora recipročne rešetke datom talasnom vektoru. Ovakve analize biće predmet naših daljih istraživanja.

Zahvalnost

Ovaj rad je urađen u okviru projekta Ministarstva za obrazovanje i nauku Republike Srbije OI br. 171039.

LITERATURA

- [1] P. Hylgaard, G. Mahan, Thermal Conductivity, Vol. 23, Tehnomic, Lancaster, 1996.
- [2] R. J. Kubo, Phys. Soc. Japan, 12, p. 570, 1957.
- [3] A. Shalchi, Phys. Rev. B, Vol 83, 046402, 2011.
- [4] D. Zubarev, Soviet Physics Uspekhi 3(3), pp. 320—345, 1960.
- [5] D. Popov, S. K. Jaćimovski, B. S. Tošić, J. P. Šetrajčić, Physica A, Vol. 317, No. 1, 129--139, ISSN~0378-4371, 2003.
- [6] J. P. Šetrajčić, V. M. Zorić, N. V. Delić, D. Lj. Mirjanić, S. K. Jaćimovski, Phonon Participation in Thermodynamics and Superconductive Properties of Thin Ceramic Films, Source: Thermodynamics, book edited by: M. Tadashi, ISBN: 978-953-307-544-0, Publisher: InTech, 2011.
- [7] M. Molina, D. Mattis, Phys. Rev. B, V.46, No.17, p.8173,1992.
- [8] A. A. Maradudin, Physics of Phonons -- 33th Winter School of Theoretical Physics, Karpacz (Poland). - Proceedings of the XXXIII Winter School of Theoretical Physics (Lecture Notes in Physics), held in Karpacz, February 1987, ISBN-13~978-3540182443,1987.
- [9] A. J. Bullen, K. E. O'Hara, D. G. Cahill, Thermal conductivity of amorphous carbon thin films <http://xxx.lanl.gov/find/cond.mat.>, No:0008084, 2001.
- [10] D. H. Santamore, M. C. Cross, The effect of surface roughness on universal thermal conductance, <http://xxx.lanl.gov/find/cond.mat.>, No:0011473,324-333, 2001.

- [11] W. E. Bies, R. Radke, H. Ehrenreich, Phonon dispersion effect and the thermal conductivity reduction in GaAs/AlAs superlattices, <http://xxx.lanl.gov/find/cond.mat.>, No:0005028, 2000.
- [12] S. Tamura, Y. Tanaka, H. J. Maris, Phys. Rev B, 60 p. 2627, 1999.
- [13] B. Feng, Z. Li, X. Zhang, Thin Solid Films, 517, p. 2803, 2009.

SUMMARY

PHONON THERMAL CONDUCTIVITY OF THIN CRYSTALLINE FILMS

In this paper we have analyzed phonon thermal conductivity of thin crystalline films, i.e. of lowdimensional structures with dimensional parameters significantly decreased in only one direction. Finding of coefficient of thermal conductivity is achieved by deriving phonon coefficient of diffusion, phonon specific heat and specific density for explored structure. Coefficient of diffusion is derived by applying method of Green functions, using Kubo formula. Then reduced thermal conductivities for film and bulk structures were compared for wider temperature interval. In the last section an influence of changes of heat conductivity on the boundaries is analyzed.

Key words: *phonons, coefficient of thermal conductivity, specific heat*