Osnovi teorije diferencnih jednačina sa primenom na analizu svojstava nanostruktura

Akademik, prof. dr Jovan P. Šetrajčić,
prof. dr Vjekoslav D. Sajfert i prof. dr Siniša M. Vučenović

Apstrakt— **Trend naglog razvoja nanotehnologija je uzrokovan otkrićima da nanostrukture poseduju fizičke karakteristike koje se znatno razlikuju od istih koje poseduju strukture velikih dimenzija (balk). Nanostrukture karakteriše i serija kvalitativno sasvim novih i izmenjenijih efekata. Npr. superkonduktivne, termoizolacione, akustičke i druge osobine koje karakterišu nanomaterijale su bolje ili sasvim drugačije od onih u balk-strukturi. Posebno je intrigantna potencijalna primena u inoviranoj farmaciji i medicini uopšte. Na neki način nanostrukturni efekti su povezani sa efektima u masivnoj strukturi slično kao što su povezani kvantni i klasični efekti. Teorijsko izučavanje balk-stuktura uglavnom zahteva rešavanje diferencijalnih jednačina sa kontinualnim promenljivama. U istraživanju mehanizama u nanostrukturama, koji su vinovnici drastičnih izmena njihovih svojstava, pojavljuju se diferencne jednačine, ali sa koeficijentima koji zavise od prostornih koordinata zbog neophodnosti da se obračunaju dimenzioni – kvantni i granični (konfajnment) uslovi, kao i uticaj vakancija i primesa. Zbog tog uvećanog interesovanja i velikih iščekivanja za korist od novootkrivenih efekata, a posebno zbog nerazvijene teorije, mi smo ovde izložili teoriju koja ima za cilj da prezentuje tehniku izračunavanja diferencnih jednačina i da to demonstrira na seriji primena u analizama različitih – otkrivenih i još neotkrivenih fizičkih svojstava nanostruktura.**

Ključne reči—**diferencne jednačine; dimenziona kvantizacija, konfajnment efekti, fizička svojstva nanostruktura.**

I. Uvod

Fizika nanostruktura doživljava intenzivan razvoj i predstavlja jedan od udarnih frontova istraživanja u savremenoj fizici [1–5]. Osnovni matematički instrument teorijskih proračuna osobina nanostuktura je diferencni račun. U skladu sa ovim, ovu prezentaciju posvećujemo diferencnom računu i njegovoj primeni na analize struktura sa narušenom translacionom simetrijom.

Osnovni trend ovde je isticanje operacionih računskih moći diferencnog računa. Zbog toga su i pri izlaganju osnova diferencnog računa i u nizu njegovih primena na nanostrukture, najčešće korišćeni translacioni operatori. Preko njih se najbrže dolazi do željenog rezultata. Udarni deo izlaganja je, zbog toga, posvećen isključivo diferencnom računu i on je operativan, bez matematičkih fundamenata tipa korolara, teorema i komplikovanih dokaza (koji se mogu naći u literaturi, npr. [6–11]).

Manji deo sadrži primene diferencnog računa u analizi fizičkih pojava u sistemima sa narušenom simetrijom, tačnije primenu te metodologije na ispitivanje nanostruktura koje su translaciono invarijantne. Uglavnom je korišćen metod Grinovih funkcija (GF) zbog toga što je ovaj metod samousaglašen, tj. on rešava i dinamiku i termodinamiku problema.

Treba naglasiti da je ovde razvijena posebna metodologija izračunavanja GF u uslovima narušene simetrije, pri čemu ovo narušenje simetrije može biti duž jednog, dva pravca i duž sva tri prostorna pravca. Problem izračunavanja GF struktura sa narušenom simetrijom je u tome što one zavise od prostornih promenljivih ponaosob, a ne od njihove razlike, kao što je to kod struktura idealne simetrije, gde GF zavisi od razlike prostornih promenljivih, a zbog homogenosti sredine pri računima se može koristiti zakon održanja impulsa [12–14]. Ovaj zakon ne važi za strukture sa narušenom simetrijom, što unosi glavnu matematičku poteškoću. Ovde je to prevaziđeno reprezentacijom stojećih talasa za Kronekerov simbol, umesto ravnih talasa kao za analize balk-struktura.

Jedan od najznačajnijih uspeha u analizi narušene simetrije u strukturama sa vodoničnim vezama je objašnjenje Krik-Votsonove teorije [15] o raspadu DNK dvostrukog lanca i objašnjenje daljeg ponašanja dva DNK makromolekula dobijena u ovom procesu. Analize difuzije eksitona u nanofilmovima [16,17] ukazuju na tačnost Sent Đerđijevih ideja [18] da eksitonski mehanizam igra značajnu ulogu u transportu elektromagnetne energije kroz biostrukture [19]. Analize elektrona u provodnim nanofilmovima i u kvantnim gredama [20,21] predstavljaju dokaz egzistencije skin-efekta. Rezultat od velikog praktičnog interesa je postojanje energijskog gepa u fononskom spektru ultratankog filma [22,23]. Poznato je da fononi u balk-strukturama nemaju gep, pa pojava u ultratankom filmu, koji je za troslojni film reda preko 100 k_B, navodi na ideju da bi on mogao da bude superprovodan i preko 100 K.

II. Elementi diferencnog računa

Diferencije i diferencne jednačine pojavljuju se u prebrojivim skupovima varijabli ([6–12]). Poznato je da se u skupovima kontinualnih varijabli pojavljuju diferencijali i diferencijalne jednačine i ta teorija je mnogo razrađenija od teorije diferencnih jednačina. S'druge strane, diferencne jednačine su bliže praksi, naročito kada se radi o problemima vezanim za kristalnu nanostrukturu. U krajnjem, celokupna materija u prirodi je diskretan entitet, pa je prirodno da se u njenom izučavanju koriste diskretne zakonitosti sa diskretnim veličinama.

Jovan P. Šetrajčić – Akademija nauka i umjetnosti Republike Srpske, Bana Lazarevića 1, 78000 Banja Luka, Republika Srpska – BiH (e-mail: jovan.setrajcic@gmail.com).

Vjekoslav D.Sajfert – Inđija, Srbija (e-mail: sajfert.vjekoslav@gmail.com)

Siniša M.Vučenović – Univerzitet u Banjoj Luci, Prirodno-matematički fakultet, Mladena Stojanovića 2, 78000 Banja Luka, Republika Srpska – BiH (e-mail: sinisa.vucenovic@pmf.unibl.org).

 ISBN 978-86-7466-930-3

Po analogiji sa izvodima u neprebrojivim skupovima, koje ćemo zvati kontinualnim izvodima, uvešćemo diskretne izvode u prebrojivim skupovima. Probleme rešavanja diferencnih jednačina vezaćemo za probleme rešavanja diferencijalnih jednačina, da bismo koristili prilaze i postupke iz ove poslednje, bolje razvijene oblasti.

A. Diferencije i diskretni izvodi

Kod diskretnih varijabli, priraštaj argumenta jednak je jedinici, pa se ovaj priraštaj ne piše u formulama. Formalna oznaka za priraštaj argumenta koristi se samo da bi se znalo po kojoj promenljivoj se diferencira.

Diskretan izvod funkcije diskretne promenljive n, dakle F_n, definiše se kao:

$$\frac{\Delta}{\Delta n}F_n = F_{n+1} - F_n \tag{II.1}$$

i on je linearan operator. Na osnovu toga mogu se potražiti i viši izvodi, npr. za drugi izvod imamo:

$$\begin{aligned}\frac{\Delta^2}{\Delta n^2}F_n &= \frac{\Delta}{\Delta n}\frac{\Delta}{\Delta n}F_n = \frac{\Delta}{\Delta n}\left(F_{n+1} - F_n\right) = \\ &= F_{n+2} - 2F_{n+1} + F_n\,; \\ \Rightarrow \frac{\Delta^m}{\Delta n^m}F_n &= \sum_{k=0}^{m}(-1)^k\binom{m}{k}F_{n+m-k}.\end{aligned} \tag{II.2}$$

Sada ćemo potražiti diskretan izvod proizvoda dve funkcije:

$$\begin{aligned}\frac{\Delta}{\Delta n}F_n\,H_n &= F_{n+1}H_{n+1} - F_nH_n = \\ &= F_{n+1}H_{n+1} - F_{n+1}H_n + F_{n+1}H_n - F_nH_n = \\ &= F_{n+1}\frac{\Delta H_n}{\Delta n} + H_n\frac{\Delta F_n}{\Delta n}.\end{aligned}$$

Međutim, vidljivo je da se ovo može izraziti i kao:

$$\begin{aligned}\frac{\Delta}{\Delta n}F_n\,H_n &= F_{n+1}H_{n+1} - F_nH_n = \\ &= F_{n+1}H_{n+1} - F_nH_{n+1} + F_nH_{n+1} - F_nH_n = \\ &= H_{n+1}\frac{\Delta F_n}{\Delta n} + F_n\frac{\Delta H_n}{\Delta n}.\end{aligned}$$

Zbog toga se izvod proizvoda definiše preko aritmetičke sredine ova dva izraza, pa nakon sređivanja sledi:

$$\frac{\Delta}{\Delta n}F_nH_n = H_n\frac{\Delta F_n}{\Delta n} + F_n\frac{\Delta H_n}{\Delta n} + \frac{\Delta F_n}{\Delta n}\frac{\Delta H_n}{\Delta n}. \tag{II.3}$$

Drugi izvod proizvoda funkcija je onda jednak:

$$\begin{aligned}\frac{\Delta^2}{\Delta n^2}F_nH_n &= H_n\frac{\Delta^2F_n}{\Delta n^2} + F_n\frac{\Delta^2H_n}{\Delta n^2} + 2\frac{\Delta H_n}{\Delta n}\frac{\Delta^2F_n}{\Delta n^2} + \\ &+ 2\frac{\Delta F_n}{\Delta n}\frac{\Delta^2H_n}{\Delta n^2} + 2\frac{\Delta F_n}{\Delta n}\frac{\Delta H_n}{\Delta n} + \frac{\Delta^2F_n}{\Delta n^2}\frac{\Delta^2H_n}{\Delta n^2}.\end{aligned} \tag{II.4}$$

Zatim, potrebno je naći i izvod količnika dve funkcije:

$$\begin{aligned}\frac{\Delta}{\Delta n}\frac{F_n}{H_n} &= \frac{F_{n+1}}{H_{n+1}} - \frac{F_n}{H_n} = \frac{F_{n+1}H_n - F_nH_{n+1}}{H_{n+1}H_n} = \\ &= \frac{F_{n+1}H_n - F_nH_n - F_nH_{n+1} + F_nH_n}{H_{n+1}H_n} = \\ &= \frac{H_n\dfrac{\Delta F_n}{\Delta n} - F_n\dfrac{\Delta H_n}{\Delta n}}{H_{n+1}H_n}.\end{aligned} \tag{II.5}$$

I konačno, potrebno je naći izvod složene diskretne funkcije:

$$\frac{\Delta}{\Delta n}F_{\varphi_n} = \frac{\Delta F_{\varphi_n}}{\Delta \varphi_n}\frac{\Delta \varphi_n}{\Delta n}. \tag{II.6}$$

B. Translacioni operatori i diskretna integracija

Pomoću translacionog operatora sa osobinama:

$$\begin{aligned}&\hat{T}_kF_n = F_{n+k}\,; \\ &\hat{T}_k^{-1} = \hat{T}_{-k}\,;\quad \hat{T}_k = \left(\hat{T}_1\right)^k;\quad \left(\hat{T}_k\right)^n = \hat{T}_{nk}\,,\end{aligned} \tag{II.7}$$

može se redefinisati diskretni izvod iz (II.1):

$$\begin{aligned}\frac{\Delta}{\Delta n}F_n &= F_{n+1} - F_n = \left(\hat{T}_1 - 1\right)F_n\,; \\ \Rightarrow \frac{\Delta^m}{\Delta n^m}F_n &= \left(\hat{T}_1 - 1\right)^mF_n = \\ &= \sum_{k=0}^{m}(-1)^k\binom{m}{k}\hat{T}_{m-k}\,F_{n+m-k}.\end{aligned} \tag{II.8}$$

Uvođenje translacionih operatora korisno je u prvom redu zbog toga što se pomoću njih može definisati operacija diskretne integracije: $\frac{\Delta^{-1}}{\Delta n}$, kao inverznu operaciju u odnosu na diskretno diferenciranje. Pošto se diskretni izvod dobija primenom operatora $\hat{T}_1 - 1$ na funkciju diskretne promenljive F_n, očigledno je da se primenom operatora $\left(\hat{T}_1 - 1\right)^{-1}$na tu istu funkciju dobija njen diskretni integral:

$$\frac{\Delta^{-1}}{\Delta n}F_n = \left(\hat{T}_1 - 1\right)^{-1}F_n, \tag{II.9}$$

ali je sada potrebno naći odgovarajuću operativnu formulu za operator: $\left(\hat{T}_1 - 1\right)^{-1}$, posebno jer se može napisati u dve forme:

$$\begin{aligned}&\left(\hat{T}_1 - 1\right) = \begin{cases}\hat{T}_1\left(1 - \hat{T}_{-1}\right), \\ -\left(1 - \hat{T}_1\right).\end{cases} \Rightarrow \\ &\Rightarrow \left(\hat{T}_1 - 1\right)^{-1} = \begin{cases}\left(1 - \hat{T}_{-1}\right)^{-1}\hat{T}_{-1} = \displaystyle\sum_{k=0}^{\infty}\hat{T}_{-k-1}\,, \\ -\left(1 - \hat{T}_1\right)^{-1} = -\displaystyle\sum_{k=0}^{\infty}\hat{T}_k\,.\end{cases}\end{aligned} \tag{II.10}$$

Zbog ovoga i diskretni integral funkcije F_n ima dve forme:

 ISBN 978-86-7466-930-3

$$\begin{aligned}\hat{J}_1 F_n &\equiv \frac{\Delta^{-1}}{\Delta n} F_n = \sum_{k=0}^{\infty} \hat{T}_{-k-1} F_n = \\ &= F_{n-1} + F_{n-2} + F_{n-3} + \dots\end{aligned} \tag{II.11a}$$

$$\begin{aligned}\hat{J}_2 F_n &\equiv \frac{\Delta^{-1}}{\Delta n} F_n = -\sum_{k=0}^{\infty} \hat{T}_k F_n = \\ &= -F_n - F_{n+1} - F_{n+2} - \dots\end{aligned} \tag{II.11b}$$

Ukoliko red iz (II.11a) ne konvergira, onda se može koristiti (II.11b) jer će on konvergirati. Važi i obrnuto.

Definisanje diskretnog integrala pomoću translacionih operatora pogodno je jer daje gotove recepte po kojima se mogu izračunavati. Metod računa sa translacionim operatorima primenljiv je na eksponencijalne, logaritamske, trigonometrijske i hiperbolične funkcije, ali i na stepene funkcije. Kod ovih poslednjih postoje izvesne specifičnosti u računu, na koje ćemo posebno ukazati. Razmotrićemo sada nekoliko diskretnih izvoda i diskretnih integrala navedenih tipičnih funkcija.

1) *Eksponencijalna funkcija* tipa: $F_n = A^{\alpha n};\ A > 1;\ \alpha > 0.$

Diskretni izvod jednak je:

$$\frac{\Delta}{\Delta n} A^{\alpha n} = A^{\alpha(n+1)} - A^{\alpha n} = A^{\alpha n}\left(A^{\alpha} - 1\right), \tag{II.12}$$

a diskretni integral, korišćenjem (II.11a):

$$\begin{aligned}\frac{\Delta^{-1}}{\Delta n} A^{\alpha n} &\equiv \hat{J}_1 A^{\alpha n} = A^{\alpha(n-1)} + A^{\alpha(n-2)} + A^{\alpha(n-3)} + \dots \\ &= A^{\alpha n}\left[-1 + \sum_{k=0}^{\infty}\left(A^{-\alpha}\right)^k\right] = \frac{A^{\alpha n}}{A^{\alpha} - 1}.\end{aligned} \tag{II.13}$$

Za funkciju $A\mathrm{e}^{-\alpha n};\ A > 1;\ \alpha > 0,$ sa (II.11a) red bi bio divergentan, zato se mora primeniti formula (II.11b):

$$\begin{aligned}\frac{\Delta^{-1}}{\Delta n} A\mathrm{e}^{-\alpha n} &= \hat{J}_2 A\mathrm{e}^{-\alpha n} \equiv -\sum_{k=0}^{\infty} \hat{T}_k A\mathrm{e}^{-\alpha n} = \\ &= -A\mathrm{e}^{-\alpha n}\left(1 + \mathrm{e}^{-\alpha} + \mathrm{e}^{-2\alpha} + \dots\right) = -\frac{A\mathrm{e}^{-\alpha n}}{1 - \mathrm{e}^{-\alpha}}.\end{aligned} \tag{II.14}$$

2) *Logaritamska funkcija* tipa: $F_n = \log_A n.$

Diskretni izvod ove funkcije je:

$$\frac{\Delta}{\Delta n} \log_A n = \log_A(n+1) - \log_A n = \log_A \frac{n+1}{n}, \tag{II.15}$$

a diskretni integral ove funkcije će biti:

$$\begin{aligned}&\frac{\Delta^{-1}}{\Delta n} \log_A n = \log_A(n-1) + \log_A(n-2) + \\ &+ \log_A(n-3) + \dots + \log_A 2 = \log_A\left[(n-1)!\right]\end{aligned} \tag{II.16}$$

3) *Trigonometrijska funkcija* tipa: $F_n = \cos n\alpha.$

Prema definiciji, diskretni izvod ove funkcije je:

$$\begin{aligned}\frac{\Delta}{\Delta n}\cos n\alpha &= \cos(n+1)\alpha - \cos n\alpha = \\ &= \cos n\alpha\cos\alpha - \sin n\alpha\sin\alpha - \cos n\alpha = \\ &= -2\sin\frac{\alpha}{2}\sin\left(n + \frac{1}{2}\right)\alpha,\end{aligned} \tag{II.17}$$

a njen diskretni integral se nalazi:

$$\begin{aligned}&\frac{\Delta^{-1}}{\Delta n}\cos\alpha n = \left(\hat{T}_1 - 1\right)^{-1}\cos\alpha n = \sum_{k=0}^{\infty}\hat{T}_{-k-1}\cos\alpha n = \\ &= \left(\hat{T}_{-1} + \hat{T}_{-2} + \hat{T}_{-3} + \dots\right)\frac{1}{2}\mathrm{e}^{i\alpha n} + \left(\hat{T}_{-1} + \hat{T}_{-2} + \hat{T}_{-3} + \dots\right)\frac{1}{2}\mathrm{e}^{-i\alpha n} = \\ &= \frac{1}{2}\mathrm{e}^{i(n-1)\alpha}\left(1 + \mathrm{e}^{-i\alpha} + \mathrm{e}^{-2i\alpha} + \dots\right) + \frac{1}{2}\mathrm{e}^{-i(n-1)\alpha}\left(1 + \mathrm{e}^{i\alpha} + \mathrm{e}^{2i\alpha} + \dots\right).\end{aligned}$$

U prvoj zagradi se uzme $\alpha \to \alpha - i\delta$, a u drugoj $\alpha \to \alpha + i\delta$, pa se traži granična vrednost sume kada $\delta \to +0$:

$$\begin{aligned}&\frac{\Delta^{-1}}{\Delta n}\cos\alpha n = \frac{1}{2}\mathrm{e}^{in\alpha}\frac{1}{\mathrm{e}^{i\alpha}}\frac{1}{1 - \mathrm{e}^{-i\alpha}} + \frac{1}{2}\mathrm{e}^{-in\alpha}\mathrm{e}^{i\alpha}\frac{1}{1 - \mathrm{e}^{i\alpha}} = \\ &= \mathrm{Re}\left\{\mathrm{e}^{in\alpha}\frac{1}{\mathrm{e}^{i\alpha} - 1}\right\} = \frac{\cos(n-1)\alpha - \cos n\alpha}{4\sin^2\frac{\alpha}{2}} = \frac{\sin\left(n - \frac{1}{2}\right)\alpha}{2\sin\frac{\alpha}{2}}.\end{aligned} \tag{II.18}$$

4) *Hiperbolična funkcija* tipa: $F_n = \cosh\ n\alpha.$

Diskretni izvod ove funkcije nalazi se preko kombinacije dve eksponencijalne funkcije:

$$\begin{aligned}\frac{\Delta}{\Delta n}\cosh n\alpha &= \frac{1}{2}\frac{\Delta}{\Delta n}\mathrm{e}^{\alpha n} + \frac{1}{2}\frac{\Delta}{\Delta n}\mathrm{e}^{-\alpha n} = \frac{1}{2}\left[\mathrm{e}^{\alpha(n+1)} - \mathrm{e}^{\alpha n} + \right. \\ &\left. + \mathrm{e}^{-\alpha(n+1)} - \mathrm{e}^{-\alpha n}\right] = 2\sinh\frac{\alpha}{2}\sinh\left(n + \frac{1}{2}\right)\alpha.\end{aligned} \tag{II.19}$$

Diskretan integral ove funkcije mora se, takođe nalaziti preko eksponencijalnih funkcija, ali za eksponencijalnu funkciju sa pozitivnim predznakom mora se primeniti operator $\hat{J}_1$, dok za onu sa negativnim predznakom $\hat{J}_2$:

$$\begin{aligned}\frac{\Delta^{-1}}{\Delta n}\cosh n\alpha &= \left(\frac{\Delta^{-1}}{\Delta n}\right)_1\frac{1}{2}\mathrm{e}^{\alpha n} + \left(\frac{\Delta^{-1}}{\Delta n}\right)_2\frac{1}{2}\mathrm{e}^{-\alpha n} \equiv \\ &\equiv \frac{1}{2}\left(\hat{J}_1\mathrm{e}^{\alpha n} + \hat{J}_2\mathrm{e}^{-\alpha n}\right) = \\ &= \frac{1}{2}\left[\left(\hat{T}_{-1} + \hat{T}_{-2} + \hat{T}_{-3} + \dots\right)\mathrm{e}^{\alpha n} - \right. \\ &\left. - \left(\hat{T}_1 + \hat{T}_2 + \hat{T}_3 + \dots\right)\mathrm{e}^{-\alpha n}\right] = \\ &= \frac{1}{2}\left[\frac{\mathrm{e}^{\alpha n}}{\mathrm{e}^{\alpha}}\left(1 + \mathrm{e}^{-\alpha} + \mathrm{e}^{-2\alpha} + \dots\right) - \right. \\ &\left. - \mathrm{e}^{-\alpha n}\left(1 + \mathrm{e}^{-\alpha} + \mathrm{e}^{-2\alpha} + \dots\right)\right] = \\ &= \frac{1}{2}\left(\frac{\mathrm{e}^{\alpha n}}{\mathrm{e}^{\alpha} - 1} + \frac{\mathrm{e}^{-\alpha n}}{\mathrm{e}^{-\alpha} - 1}\right) = \\ &= \left(2\ \sinh\frac{\alpha}{2}\right)^{-1}\sinh\left(n - \frac{1}{2}\right)\alpha.\end{aligned} \tag{II.20}$$

 ISBN 978-86-7466-930-3

Sličnim postupkom mogu se odrediti diskretni izvodi i diskretni integrali za funkciju tipa $F_n = \sinh\, n\alpha$:

$$\frac{\Delta}{\Delta n}\sinh n\alpha = 2\,\sinh\frac{\alpha}{2}\cosh\left(n+\frac{1}{2}\right)\alpha. \qquad \text{(II.21)}$$

$$\frac{\Delta^{-1}}{\Delta n}\sinh n\alpha = \left(2\,\sinh\frac{\alpha}{2}\right)^{-1}\cosh\left(n-\frac{1}{2}\right)\alpha. \qquad \text{(II.22)}$$

5) *Stepena funkcija* tipa: $F_n = n^{-\alpha}$; $\alpha > 0$.

Diskretni izvod ove funkcije nalazi se preko definicije:

$$\frac{\Delta}{\Delta n}n^{-\alpha} = \left(\hat{T}_1 - 1\right)n^{-\alpha} = (n+1)^{-\alpha} - n^{-\alpha} = -n^{-\alpha}\left[1-\left(\frac{n}{n+1}\right)^{\alpha}\right], \qquad \text{(II.23)}$$

a diskretni integral obavezno se mora računati pomoću operatora $\hat{J}_2$, jer bi se u računu pomoću operatora $\hat{J}_1$, pojavili singulariteti:

$$\begin{aligned}\frac{\Delta^{-1}}{\Delta n}n^{-\alpha} &= \hat{J}_2 n^{-\alpha} = -\sum_{k=0}^{\infty}\hat{T}_k n^{-\alpha} = \\ &= n^{\alpha} + (n+1)^{-\alpha} + (n+2)^{-\alpha} + \ldots = -\sum_{k=0}^{\infty}(n+k)^{-\alpha}.\end{aligned} \qquad \text{(II.24)}$$

U slučaju da je: $f_n = n^{\alpha}$; $\alpha > 0$, onda je diskretni izvod:

$$\frac{\Delta}{\Delta n}n^{\alpha} = \left(\hat{T}_1 - 1\right)n^{\alpha} = (n+1)^{\alpha} - n^{\alpha} = (n+1)^{\alpha}\left[1-\left(\frac{n}{n+1}\right)^{\alpha}\right], \qquad \text{(II.25)}$$

A za izračunavanje diskretnog integrala mora primeniti operatora $\hat{J}_1$:

$$\begin{aligned}\frac{\Delta^{-1}}{\Delta n}n^{\alpha} &= \hat{J}_1 n^{\alpha} = \sum_{k=0}^{\infty}\hat{T}_{-k-1}n^{\alpha} = (n-1)^{\alpha} + (n-2)^{\alpha} + \ldots = \\ &= \sum_{q=1}^{\infty}(n-q)^{\alpha} \Rightarrow = \sum_{q=1}^{n-1}(n-q)^{\alpha}.\end{aligned} \qquad \text{(II.26)}$$

(beskonačni red morao je da se "preseče" za $q = n$).

C. Diferencne jednačine prvog reda

U ovom delu posmatraćemo linearne diferencne jednačine sa promenljivim koeficijentima.

1) *Homogena linearna diferencna jednačina* je tipa:

$$\frac{\Delta Y_n}{\Delta n} + a_n Y_n = 0. \qquad \text{(II.27)}$$

Rešavanje ove diferencne jednačine svodi se na nalaženje rekurentnog obrasca sa jednom diferencijom:

$$Y_{n+1} - Y_n + a_n Y_n = 0 \quad \Rightarrow \quad Y_{n+1} = (1-a_n)Y_n,$$

a odatle:

$$Y_1 = (1-a_0)Y_0;\ Y_2 = (1-a_1)Y_1 = (1-a_0)(1-a_1)Y_0;\ \cdots$$

$$\begin{aligned}Y_n &= (1-a_0)(1-a_1)(1-a_2)\ldots(1-a_{n-1})Y_0 = \\ &= Y_0\prod_{s=0}^{n-1}(1-a_s).\end{aligned} \qquad \text{(II.28)}$$

2) *Nehomogena linearna diferencna jednačina* ima oblik:

$$\frac{\Delta Y_n}{\Delta n} + a_n Y_n = b_n \qquad \text{(II.29)}$$

i ona se rešava operatorskim putem:

$$\left[\left(\hat{T}_1 - 1\right) + a_n\right]Y_n = b_n \quad \Rightarrow \quad Y_n = \left[\left(\hat{T}_1 - 1\right) + a_n\right]^{-1}b_n. \qquad \text{(II.30)}$$

Operator $\left(\hat{T}_1 - 1\right) + a_n$ može se izraziti na dva nezavisna načina:

$$\left(\hat{T}_1 - 1\right) + a_n = \begin{cases} a_n\left[1 + a_n^{-1}\left(\hat{T}_1 - 1\right)\right]; \\ \left(\hat{T}_1 - 1\right)\left[1 + \left(\hat{T}_1 - 1\right)^{-1}a_n\right], \end{cases}$$

pa imamo i dve forme inverznih operatora:

$$\begin{aligned}\hat{J}_1 &= \sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k\left[a_n^{-1}\left(\hat{T}_1 - 1\right)\right]^k a_n^{-1}; \\ \hat{J}_2 &= \sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k\left[\left(\hat{T}_1 - 1\right)^{-1}a_n\right]^k\left(\hat{T}_1 - 1\right)^{-1}.\end{aligned} \qquad \text{(II.31)}$$

Pošto operator $\hat{T}_1$ i multiplikativni operator a_n ne komutiraju, imamo:

$$\begin{aligned}&\left(\hat{T}_1 - 1\right)a_n F_n = a_{n+1}F_{n+1} - a_n F_n; \\ &a_n\left(\hat{T}_1 - 1\right)F_n = a_n\left(F_{n+1} - F_n\right) = a_n F_{n+1} - a_n F_n,\end{aligned}$$

pa se stepeni iz (II.29) moraju uzeti u formi:

$$\left[a_n^{-1}\left(\hat{T}_1 - 1\right)\right]^k = \underbrace{a_n^{-1}\left(\hat{T}_1 - 1\right)a_n^{-1}\left(\hat{T}_1 - 1\right)\ldots a_n^{-1}\left(\hat{T}_1 - 1\right)}_{k\ \text{puta}};$$

$$\left[\left(\hat{T}_1 - 1\right)^{-1}a_n\right]^k = \underbrace{\left(\hat{T}_1 - 1\right)^{-1}a_n\left(\hat{T}_1 - 1\right)^{-1}a_n\ldots\left(\hat{T}_1 - 1\right)^{-1}a_n}_{k\ \text{puta}}.$$

Rešenje jednačine (II.27) dobija se primenom samo jednog od operatora $\hat{J}_1$, odnosno $\hat{J}_2$ i to onog koji primenjen na b_n daje konvergentan red. Znači, rešenje jednačine (II.30) je:

$$Y_n = \hat{J}_1 b_n, \quad \text{ili} \quad Y_n = \hat{J}_2 b_n. \qquad \text{(II.32)}$$

Ako funkcije *a* i *b* ne zavise od promenljive *n* onda se ovim operatorskim metodom relativno jednostavno mogu rešiti nehomogene diferencne jednačine prvog reda. Ukoliko pak obe funkcije *a* i *b* zavise od promenljive *n,* rešenje je glomazno, ali se i ono lako nalazi. Tu nam uvek pomože smena funkcije:

$$Y_n = U_n Z_n \Rightarrow \frac{\Delta Y_n}{\Delta n} = U_n\frac{\Delta Z_n}{\Delta n} + Z_n\frac{\Delta U_n}{\Delta n} + \frac{\Delta U_n}{\Delta n}\frac{\Delta Z_n}{\Delta n}, \qquad \text{(II.33)}$$

jer se polazna jednačina (II.29) uprosti: ona se rešava po Z_n, a funkciju U_n odredimo tako da jednačina za Z_n bude uprošćena. Zamenom smene u (II.29) i deobom sa U_n, dobija se:

ISBN 978-86-7466-930-3

$$\left(1+\frac{1}{U_n}\frac{\Delta U_n}{\Delta n}\right)\frac{\Delta Z_n}{\Delta n}+\left(\frac{1}{U_n}\frac{\Delta U_n}{\Delta n}+a_n\right)Z_n=\frac{b_n}{U_n}.$$

I sada se U_n određuje da „otpadne“ član uz Z_n:

$$\frac{1}{U_n}\frac{\Delta U_n}{\Delta n}=-a_n\Rightarrow\frac{\Delta U_n}{\Delta n}=-a_nU_n\Rightarrow$$
$$\Rightarrow U_{n+1}-U_n=-a_nU_n\Rightarrow U_{n+1}=(1-a_n)U_n,$$

odnosno, za n = 0, 1, 2, ...:

$$\begin{aligned}
U_1&=(1-a_0)U_0,\\
U_2&=(1-a_1)U_1=(1-U_0)(1-a_1)U_0,\\
U_3&=(1-a_2)U_2=(1-U_0)(1-a_1)(1-a_2)U_0,\\
&\dots\qquad\dots\qquad\dots\qquad\dots\\
U_n&=U_0\prod_{k=0}^{n-1}(1-a_k).
\end{aligned}$$

Dalje ćemo uzeti da je $U_0=1$, pa jednačina za Z_n postaje:

$$(1-a_n)\frac{\Delta Z_n}{\Delta n}=\frac{b_n}{U_n}\Rightarrow\frac{\Delta Z_n}{\Delta n}=\frac{b_n}{1-a_n}\frac{1}{U_n}\Rightarrow$$
$$\Rightarrow\frac{\Delta Z_n}{\Delta n}=\frac{b_n}{1-a_n}\frac{1}{\prod\limits_{k=0}^{n-1}(1-a_k)}\Rightarrow$$
$$\Rightarrow Z_n=\frac{\Delta^{-1}}{\Delta n}\left\{\frac{b_n}{1-a_n}\left[\prod_{k=0}^{n-1}(1-a_k)\right]^{-1}\right\}+C.$$

Nakon zamene u (II.33), rešenje polazne jednačine je:

$$\begin{aligned}Y_n&=C\prod_{k=0}^{n-1}(1-a_k)+\\&+\prod_{k=0}^{n-1}(1-a_k)\frac{\Delta^{-1}}{\Delta n}\left\{\frac{b_n}{1-a_n}\left[\prod_{k=0}^{n-1}(1-a_k)\right]^{-1}\right\}.\end{aligned}\tag{II.34}$$

D. Snižavanje reda diferencne jednačine drugog reda

U opštem slučaju, diferencne jednačine drugog reda sadrže argument funkcije, diskretnu funkciju, prvi izvod diskretne funkcije i drugi izvod diskretne funkcije.

Jedan od načina rešavanja diferencnih jednačina drugog reda je njihovo svođenje na diferencne jednačine prvog reda. Red diferencne jednačine može se sniziti ako u njoj figurišu argument, kao i prvi i drugi diskretni izvod funkcije. Drugi slučaj, kada je moguće snižavanje reda, predstavljaju diferencne jednačine u kojima figurišu funkcija diskretne promenljive i njen prvi i drugi diskretni izvod.

Prvi pomenuti slučaj je zadat relacijom:

$$\Phi\left(n,\frac{\Delta Y_n}{\Delta n},\frac{\Delta^2 Y_n}{\Delta n^2}\right)=0,\tag{II.35}$$

koja smenom:

$$\frac{\Delta Y_n}{\Delta n}=p_n\Rightarrow\frac{\Delta^2 Y_n}{\Delta n^2}=\frac{\Delta p_n}{\Delta n},$$

prelazi u diferencnu jednačinu prvog reda:

$$\Phi\left(n,p_n,\frac{\Delta p_n}{\Delta n}\right)=0.\tag{II.36}$$

Drugi pomenuti slučaj je jednačina ovog oblika:

$$\Psi\left(Y_n,\frac{\Delta Y_n}{\Delta n},\frac{\Delta^2 Y_n}{\Delta n^2}\right)=0.\tag{II.37}$$

I ovde se uzima ista smena: $\frac{\Delta Y_n}{\Delta n}=p_n$, ali se drugi izvod nalazi na sledeći način:

$$\frac{\Delta^2 Y_n}{\Delta n^2}=\frac{\Delta p_n}{\Delta n}=\frac{\Delta Y_n}{\Delta Y_n}\frac{\Delta p_n}{\Delta n}=\frac{\Delta Y_n}{\Delta n}\frac{\Delta p_n}{\Delta Y_n}=p_n\frac{\Delta p_n}{\Delta Y_n},$$

čime (II.35) prelazi u diferencnu jednačinu prvog reda:

$$\Psi\left(Y_n,p_n,\frac{\Delta p_n}{\Delta Y_n}\right)=0.\tag{II.38}$$

E. Linearne diferencne jednačine sa stalnim koeficijentima

1) *Nehomogena linearna diferencna jednačina I reda*

je oblika:

$$\frac{\Delta Y_n}{\Delta n}+aY_n=0,\tag{II.39}$$

a rešava se prema definiciji (II.1):

$$Y_{n+1}-Y_n+aY_n=0\Rightarrow Y_{n+1}-(1-a)Y_n=0$$

i uvođenjem smene: $Y_n=x^n$, pa sledi:

$$x^{n+1}-(1-a)x^n=0\Rightarrow x=1-a.$$

Konačno rešenje je onda:

$$Y_n=(1-a)^n.\tag{II.40}$$

2) *Nehomogena linearna diferencna jednačina II reda* ima oblik:

$$\frac{\Delta^2 Y_n}{\Delta n^2}+a_1\frac{\Delta Y_n}{\Delta n}+a_2Y_n=0\tag{II.41}$$

i ona se, prema definiciji (II.1) i (II.2) svodi na:

$$Y_{n+2}-(2-a_1)Y_{n+1}+(1-a_1+a_2)Y_n=0,$$

koja se rešava istom smenom: $Y_n=x^n$, te sledi:

$$x^2-(2-a_1)x+(1+a_2)=0\Rightarrow x_{1,2}=1-\frac{a_1}{2}\pm\sqrt{\frac{a_1^2}{4}-a_1-a_2}.$$

To znači da polazna jednačina ima dva partikularna integrala:

 ISBN 978-86-7466-930-3

$$Y_n^{(1)} = x_1^n = \left(1 - \frac{a_1}{2} + \sqrt{\frac{a_1^2}{4} - a_1 - a_2}\right)^n, \quad Y_n^{(2)} = x_2^n = \left(1 - \frac{a_1}{2} - \sqrt{\frac{a_1^2}{4} - a_1 - a_2}\right)^n. \tag{II.42}$$

3) *Primer iz fizike kristala*

Jednačina kojom se opisuje jednodimenziono prostiranje poremećaja u kristalima sa pravilnom rešetkom je oblika [24]:

$$Y_{n+1} + Y_{n-1} + \rho\, Y_n = 0, \tag{II.43}$$

gde je parametar $\rho \neq \rho(n)$ = const – za neograničene kristale sa translacionom simetrijom (idealne balk kristalne strukture). Ukazanom smenom $Y_n = x^n$, jednačina (II.43) prelazi u:

$$x + x^{-1} + \rho = 0 \Rightarrow x^2 + \rho\, x + 1 = 0 \;\Rightarrow x_{1,2} = -\frac{\rho}{2} \pm \sqrt{\frac{\rho^2}{4} - 1}.$$

Dva partikularna rešenja jednačine (II. 43) su onda:

$$Y_n^{(1)} = \left(-\frac{\rho}{2} + \sqrt{\frac{\rho^2}{4} - 1}\right)^n; \quad Y_n^{(2)} = \left(-\frac{\rho}{2} - \sqrt{\frac{\rho^2}{4} - 1}\right)^n,$$

a opšte rešenje:

$$Y_n = C_1 Y_n^{(1)} + C_2 Y_n^{(2)}, \tag{II.44}$$

gde se konstante C_1 i C_2 određuju iz početnih uslova.

III. Operatorsko rešavanje diferencnih jednačina drugog reda i primena

A. *Opšti slučaj – pristup rešavanja*

Posmatramo diferencnu jednačinu oblika:

$$\frac{\Delta^2 Y_n}{\Delta n^2} + \hat{f}_n Y_n = 0, \tag{III.1}$$

koja se, s´obzirom na (II.2) može napisati kao:

$$\left[\left(\hat{T}_1 - 1\right)^2 + \hat{f}_n\right] Y_n = 0. \tag{III.2}$$

Sada formiramo odgovarajuću nehomogenu jednačinu:

$$\left[\left(\hat{T}_1 - 1\right)^2 + \hat{f}_n\right] y_n = \Phi_n \Rightarrow y_n = \left[\left(\hat{T}_1 - 1\right)^2 + \hat{f}_n\right]^{-1} \Phi_n. \tag{III.3}$$

Ovo je formalno rešenje polaznog problema, a prema opštoj teoriji diferencnih jednačina, treba da ima dva nezavisna partikularna integrala: $y_n^{(1)}$ i $y_n^{(2)}$:

$$\left[\left(\hat{T}_1 - 1\right)^2 + \hat{f}_n\right] y_n^{(1)} = \Phi_n; \quad \left[\left(\hat{T}_1 - 1\right)^2 + \hat{f}_n\right] y_n^{(2)} = \Phi_n. \tag{III.4}$$

Lako je uočiti da se oduzimanjem ove dve jednačine dobija traženo rešenje jednačine u formi (III.2):

$$\left[\left(\hat{T}_1 - 1\right)^2 + \hat{f}_n\right]\left(y_n^{(1)} - y_n^{(2)}\right) = 0 \;\Rightarrow\; Y_n \equiv y_n^{(1)} - y_n^{(2)}. \tag{III.5}$$

To znači da je potrebno odrediti ova dva partikularna rešenja.

Kako se operator $\left(\hat{T}_1 - 1\right)^2 + \hat{f}_n$ može se napisati na dva potpuno različita načina:

$$\left(\hat{T}_1 - 1\right)^2 + \hat{f}_n = \begin{cases} \hat{f}_n\left[1 + \hat{f}_n^{-1}\left(\hat{T}_1 - 1\right)^2\right]; \\ \left(\hat{T}_1 - 1\right)^2\left[1 + \left(\hat{T}_1 - 1\right)^{-2}\hat{f}_n\right], \end{cases}$$

onda i operator $\left[\left(\hat{T}_1 - 1\right)^2 + \hat{f}_n\right]^{-1}$ ima sledeće dve forme:

$$\left[\left(\hat{T}_1 - 1\right)^2 + \hat{f}_n\right]^{-1} = \begin{cases} \hat{J}_1 \equiv \left[1 + \hat{f}_n^{-1}\left(\hat{T}_1 - 1\right)^2\right]^{-1}\hat{f}_n^{-1} = \\ \quad = \sum\limits_{k=0}^{\infty}(-1)^k\left[\hat{f}_n^{-1}\left(\hat{T}_1 - 1\right)^2\right]^k \hat{f}_n^{-1}; \\ \hat{J}_2 \equiv \left[1 + \left(\hat{T}_1 - 1\right)^{-2}\hat{f}_n\right]^{-1}\left(\hat{T}_1 - 1\right)^{-2} = \\ \quad = \sum\limits_{k=0}^{\infty}(-1)^k\left[\left(\hat{T}_1 - 1\right)^{-2}\hat{f}_n\right]^k\left(\hat{T}_1 - 1\right)^{-2}. \end{cases} \tag{III.6}$$

Operatori $\hat{J}_1$ i $\hat{J}_2$ napisani u eksplicitnoj formi su:

$$\hat{J}_1 = \left[1 - \hat{f}_n^{-1}\left(\hat{T}_1 - 1\right)^2 + \hat{f}_n^{-1}\left(\hat{T}_1 - 1\right)^2\hat{f}_n^{-1}\left(\hat{T}_1 - 1\right)^2 - \ldots\right]\hat{f}_n^{-1};$$
$$\hat{J}_2 = \left[1 - \left(\hat{T}_1 - 1\right)^{-2}\hat{f}_n + \left(\hat{T}_1 - 1\right)^{-2}\hat{f}_n\left(\hat{T}_1 - 1\right)^{-2} - \ldots\right]\left(\hat{T}_1 - 1\right)^{-2}$$

i moraju se pisati i računati u datom poretku, jer operatori $\hat{f}_n$ i $\hat{T}_1 - 1$ ne komutiraju! Dva partikularna integrala nalaze se onda kao:

$$y_n^{(1)} = \hat{J}_1\Phi_n; \quad y_n^{(2)} = \hat{J}_2\Phi_n. \tag{III.7}$$

Sada treba konkretizovati funkciju Φ_n, a treba je odabrati tako da se jedan od dva beskonačna reda iz (III.6) preseče. Pošto je: $\left(\hat{T}_1 - 1\right)^2 C = 0$, biramo: $\Phi_n = f_n$, pa su onda:

$$y_n^{(1)} = \left[1 - \hat{f}_n^{-1}\left(\hat{T}_1 - 1\right)^2 + \hat{f}_n^{-1}\left(\hat{T}_1 - 1\right)^2\hat{f}_n^{-1}\left(\hat{T}_1 - 1\right)^2 - \ldots\right]\hat{f}_n^{-1} f_n = 1;$$
$$y_n^{(2)} = \left[1 - \left(\hat{T}_1 - 1\right)^{-2}\hat{f}_n + \left(\hat{T}_1 - 1\right)^{-2}\hat{f}_n\left(\hat{T}_1 - 1\right)^{-2} - \ldots\right]\left(\hat{T}_1 - 1\right)^{-2} f_n,$$

a ukupno traženo rešenje polazne jednačine je:

$$Y_n = 1 - \left(\hat{T}_1 - 1\right)^{-2}\hat{f}_n + \left(\hat{T}_1 - 1\right)^{-2}\hat{f}_n\left(\hat{T}_1 - 1\right)^{-2}\hat{f}_n - \ldots = \sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k\left[\left(\hat{T}_1 - 1\right)^{-2}\hat{f}_n\right]^k. \tag{III.8}$$

B. *Diferencna jednačina stanja kristalnih nano-struktura*

Kao što je rečeno, u problemima fizike kristala [24-28] često se pojavljuje diferencna jednačina tipa:

$$Y_{n+1} + Y_{n-1} + \rho_n Y_n = 0, \tag{III.9}$$

koja se od (II.41) razlikuje po tome što parametar ρ (bitno!) zavisi od argumenta n, tj. $\rho = \rho_n$, čime se opisuje translaciona

 ISBN 978-86-7466-930-3

neinvarijantnost (realnih i posebno nano) kristala, a argument definiše položaj molekula (atoma, jona) u kristalu.

Upotrebom translacionih operatora ova jednačina može se napisati u sledećem obliku:

$$\left(\hat{T}_1 + \hat{T}_{-1} + \hat{\rho}_n\right) Y_n = 0. \qquad \text{(III.10)}$$

U prethodnom paragrafu je naglašeno da se krucijalan zahtev za nalaženje rešenja ovom metodom sastojao u tome da jedan od operatora primenjen na konstantu u rezultatu daje nulu. Ovde imamo operatore $\hat{T}_1 + \hat{T}_{-1}$ i $\hat{\rho}_n$. Ni jedan od njih primenjen na konstantu, ne može dati nulu. Zato izraz (III.10) moramo transformisati u:

$$\left[\left(\hat{T}_1 + \hat{T}_{-1} - 2\right) + \left(\hat{\rho}_n + 2\right)\right] Y_n = 0,$$

jer operator $\left(\hat{T}_1 + \hat{T}_{-1} - 2\right)$, primenjen na konstantu, daje nulu:

$$\left(\hat{T}_1 + \hat{T}_{-1} - 2\right)C = \hat{T}_1 C + \hat{T}_{-1} C - 2C = C + C - 2C = 0.$$

Radi pojednostavljenja, uvedemo oznake:

$$\hat{a} = \hat{T}_1 + \hat{T}_{-1} - 2; \; \hat{b}_n = \hat{\rho}_n + 2,$$

pa jednačina (III.10) postaje:

$$\left(\hat{a} + \hat{b}_n\right) Y_n = 0, \qquad \text{(III.11)}$$

pri čemu je $\hat{a}\, C = 0$.

Pošto je ova jednačina homogena, njeno rešenje ćemo tražiti, kao i u prethodnom paragrafu, preko odgovarajuće pomoćne nehomogene jednačine:

$$\left(\hat{a} + \hat{b}_n\right) y_n = \Phi_n, \qquad \text{(III.12)}$$

koja ima dva linearno nezavisna rešenja: $y_n^{(1)} = \hat{J}_1 \Phi_n$ i $y_n^{(2)} = \hat{J}_2 \Phi_n$, a pomoću kojih je traženo opšte rešenje jednako: $Y_n \equiv y_n^{(1)} - y_n^{(2)}$. Ostaje da nađemo ove partikularne integrale. Na osnovu dvostrukog razvoja operatora:

$$\hat{a} + \hat{b}_n = \begin{cases} \hat{b}_n\left(1 + \hat{b}_n^{-1}\hat{a}\right), \\ \hat{a}\left(1 + \hat{a}^{-1}\hat{b}_n\right). \end{cases}$$

odnosno inverznog operatora:

$$\begin{aligned} \left(\hat{a} + \hat{b}_n\right)^{-1} &= \left(1 + \hat{b}_n^{-1}\hat{a}\right)\hat{b}_n^{-1} = \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \left(\hat{b}_n^{-1}\hat{a}\right)^k \hat{b}_n^{-1} \equiv \hat{J}_1 : \\ \left(\hat{a} + \hat{b}_n\right)^{-1} &= \left(1 + \hat{a}^{-1}\hat{b}_n\right)^{-1} \hat{a}^{-1} = \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \left(\hat{a}^{-1}\hat{b}_n\right)^k \hat{a}^{-1} \equiv \hat{J}_2 , \end{aligned}$$

dobijamo:

$$\begin{aligned} y_n^{(1)} &= \hat{J}_1 \Phi_n = \left(1 - \hat{b}_n^{-1}\hat{a} + \hat{b}_n^{-1}\hat{a}\hat{b}_n^{-1}\hat{a} + \ldots\right)\hat{b}_n^{-1}\Phi_n; \\ y_n^{(2)} &= \hat{J}_2 \Phi_n = \left(1 - \hat{a}^{-1}\hat{b}_n + \hat{a}^{-1}\hat{b}_n\hat{a}^{-1}\hat{b}_n - \ldots\right)\hat{a}^{-1}\Phi_n. \end{aligned}$$

Ukoliko sada specificiramo funkciju Φ_n – uzmemo da je: $\Phi_n = \hat{b}_n$, onda se prvo rešenje dobija u vidu:

$$y_n^{(1)} = \left(1 - \hat{b}_n^{-1}\hat{a} + \hat{b}_n^{-1}\hat{a}\hat{b}_n^{-1}\hat{a} - \ldots\right)\hat{b}_n^{-1}\hat{b}_n = 1,$$

a dobijen je zahvaljujući činjenici da je $\hat{a} \cdot 1 = 0$.

Drugo rešenje se izražava kao:

$$y_n^{(2)} = \hat{a}^{-1}\hat{b}_n - \hat{a}^{-1}\hat{b}_n\hat{a}^{-1}\hat{b}_n + \hat{a}^{-1}\hat{b}_n\hat{a}^{-1}\hat{b}_n\hat{a}^{-1}\hat{b}_n - \ldots$$

i da bi se izračunalo treba naći eksplicitnu formu operatora $\hat{a}^{-1}$. Kako operator $\hat{a}$ ima dva oblika:

$$\hat{a} = \hat{T}_1 + \hat{T}_{-1} - 2 = \begin{cases} -2\left[1 - \frac{1}{2}\left(\hat{T}_1 + \hat{T}_{-1}\right)\right], \\ \left(\hat{T}_1 + \hat{T}_{-1}\right)\left[1 - 2\left(\hat{T}_1 + \hat{T}_{-1}\right)^{-1}\right]. \end{cases}$$

onda postoje i dve forme njemu inverznog operatora:

$$\begin{aligned} \hat{a}^{-1} &= -\left[1 - \frac{1}{2}\left(\hat{T}_1 + \hat{T}_{-1}\right)\right]^{-1} = -\sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{2^{k+1}}\left(\hat{T}_1 + \hat{T}_{-1}\right)^k \equiv \hat{A}_1; \\ \hat{a}^{-1} &= \left[1 - 2\left(\hat{T}_1 + \hat{T}_{-1}\right)^{-1}\right]^{-1}\left(\hat{T}_1 + \hat{T}_{-1}\right)^{-1} = \\ &= -\sum_{k=0}^{\infty} 2^k \left(\hat{T}_1 + \hat{T}_{-1}\right)^{-k-1} \equiv \hat{A}_2, \end{aligned} \qquad \text{(III.13)}$$

ali se i operator $\left(\hat{T}_1 + \hat{T}_{-1}\right)^{-1}$ može napisati u dve različite forme, jer je:

$$\hat{T}_1 + \hat{T}_{-1} = \begin{cases} \hat{T}_1\left(1 + \hat{T}_{-2}\right); \\ \hat{T}_{-1}\left(1 + \hat{T}_2\right), \end{cases}$$

pa su:

$$\begin{aligned} \left(\hat{T}_1 + \hat{T}_{-1}\right)^{-1} &= \left(1 + \hat{T}_{-2}\right)^{-1}\hat{T}_{-1} = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \hat{T}_{-2k-1} \equiv \hat{\theta}_1; \\ \left(\hat{T}_1 + \hat{T}_{-1}\right)^{-1} &= \left(1 + \hat{T}_2\right)^{-1}\hat{T}_1 = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \hat{T}_{2k+1} \equiv \hat{\theta}_2. \end{aligned}$$

Operatorske forme $\hat{A}_1$, $\hat{A}_2$, $\hat{\theta}_1$ i $\hat{\theta}_2$ biraju se tako da rezultat njihove primene na datu funkciju diskretne promenljive bude konvergentan red. Kada je taj izbor napravljen, može se izračunati $y_n^{(2)}$. Rešenje polazne homogene jednačine biće dato preko:

$$\begin{aligned} Y_n = y_n^{(1)} - y_n^{(2)} &= 1 - \hat{a}^{-1}\hat{b}_n + \hat{a}^{-1}\hat{b}_n\hat{a}^{-1}\hat{b}_n - \ldots = \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \left(\hat{a}^{-1}\hat{b}_n\right)^k. \end{aligned} \qquad \text{(III.14)}$$

C. Jedan karakterisičan primer

Kao primer posmatraćemo slučaj kada je: $\rho_n = A\mathrm{e}^{n\alpha} - 2$, tj. diferencnu jednačinu:

ISBN 978-86-7466-930-3

$$Y_{n+1} + Y_{n-1} + \left(A\mathrm{e}^{n\alpha} - 2\right)Y_n = 0, \qquad \text{(III.15)}$$

gde zaključujemo da je: $\hat{b}_n = A\,\mathrm{e}^{n\alpha}$, pa zbog toga što je to eksponencijalna funkcija, neke od operatora ne moramo tražiti preko beskonačnih redova. Tako se vidi da je:

$$\left(\hat{T}_1 + \hat{T}_{-1}\right)A\mathrm{e}^{n\alpha} = 2\cosh\alpha\; A\mathrm{e}^{n\alpha},$$

a kako je: $\left(\hat{T}_1 + \hat{T}_{-1}\right)^{-1}\left(\hat{T}_1 + \hat{T}_{-1}\right) = 1$, znači da je:

$$\left(\hat{T}_1 + \hat{T}_{-1}\right)^{-1} A\mathrm{e}^{n\alpha} = \frac{1}{2\cosh\alpha} A\mathrm{e}^{n\alpha}.$$

S obzirom da je $\cosh\alpha > 1$, moramo koristiti one operatorske redove u kojima figuriše operator $\left(\hat{T}_1 + \hat{T}_{-1}\right)^{-1}$. Takav je red (III.13). To znači da će u (III.14) operator $\hat{a}^{-1}$, primenjen na funkciju $A\mathrm{e}^{n\alpha}$, dati rezultat:

$$\begin{aligned}\hat{a}^{-1}\hat{b}_n &= \hat{a}^{-1}A\mathrm{e}^{n\alpha} = \sum_{k=0}^{\infty} 2^k \left(\hat{T}_1 + \hat{T}_{-1}\right)^{-k-1} A\mathrm{e}^{n\alpha} = \\ &= A\mathrm{e}^{n\alpha}\sum_{k=0}^{\infty} 2^k \frac{1}{2^{k+1}\cosh^{k+1}\alpha} = \frac{A\mathrm{e}^{n\alpha}}{2\cosh\alpha}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{(\cosh\alpha)^k} = \\ &= \frac{A\mathrm{e}^{n\alpha}}{2(\cosh\alpha - 1)},\end{aligned}$$

pa dalje sledi:

$$\begin{aligned}\hat{a}^{-1}\hat{b}_n\hat{a}^{-1}\hat{b}_n &= \hat{a}^{-1}A\mathrm{e}^{n\alpha}\frac{A\mathrm{e}^{n\alpha}}{2(\cosh\alpha - 1)} = \\ &= \frac{A^2\mathrm{e}^{2n\alpha}}{2^2(\cosh\alpha - 1)(\cosh 2\alpha - 1)}.\end{aligned}$$

Prema tome, izraz (III.15) se može pisati kao:

$$\begin{aligned}Y_n &= 1 - \frac{A\mathrm{e}^{n\alpha}}{2(\cosh\alpha - 1)} + \frac{A^2\mathrm{e}^{2n\alpha}}{2^2(\cosh\alpha - 1)(\cosh 2\alpha - 1)} - \cdots = \\ &= \sum_{k=1}^{\infty}(-1)^k\left(\frac{A\mathrm{e}^{n\alpha}}{2}\right)^k \frac{1}{\prod_{s=1}^{k}(\cosh s\alpha - 1)}.\end{aligned} \qquad \text{(III.16)}$$

Sada treba pokazati da ovo rešenje zadovoljava polaznu jednačinu (III.15). Kada se rešenje (III.16) uvrsti u tu jednačinu, lako se vidi da suma prvog, drugog i četvrtog člana iznosi:

$$\sum_{k=1}^{\infty}(-1)^k\left(\frac{A\mathrm{e}^{n\alpha}}{2}\right)^k \frac{2(\cosh k\alpha - 1)}{\prod_{s=0}^{k}(\cosh, s\alpha - 1)}$$

a treći član se može napisati na sledeći način:

$$-\sum_{k=1}^{\infty}(-1)^k\left(\frac{A\mathrm{e}^{n\alpha}}{2}\right)^{k+1} \frac{2[\cosh(k+1)\alpha - 1]}{\prod_{s=0}^{q}(\cosh s\alpha - 1)}$$

i on, posle zamene sumacionog indeksa $k+1 = q$, postaje:

$$-\sum_{q=1}^{\infty}(-1)^q\left(\frac{A\mathrm{e}^{n\alpha}}{2}\right)^q \frac{2(\cosh\alpha q - 1)}{\prod_{s=0}^{q}(\cosh s\alpha - 1)}.$$

Vidi se da je ovaj rezultat jednak onom od sume prvog, drugog i četvrtog člana, ali sa suprotnim znakom, što znači da je njihov zbir jednak nuli. Dakle, rešenje (III.16) upravo predstavlja rešenje polazne jednačine (III.15).

Na kraju ćemo potražiti konkretan fizički sistem kod koga se pojavljuje jednačina tipa (III.15). Ako se posmatra oscilovanje jednodimenzionog lanca molekula [12,13,22,23,29,30], onda je popravka potencijalne energije lanca, koja potiče od oscilovanja molekula, data sa:

$$V = \frac{C}{2}\sum_m \left(u_m - u_{m-1}\right)^2, \qquad \text{(III.17)}$$

gde je u_m pomeraj molekula iz ravnotežnog položaja čija je koordinata označena sa *m*, dok je *C* – Hukova konstanta istezanja i predstavlja drugi izvod međumolekulske interakcije po rastojanju između molekula. Torzione konstante (i odgovarajući modovi!) se zanemaruju. Oscilatorna sila, koja deluje na molekul u tački *n*, definiše se klasično preko:

$$F_n = -\frac{\partial V}{\partial u_n}, \text{ odnosno: } F_n = -\frac{\Delta V}{\Delta u_n} \qquad \text{(III.18)}$$

i jednaka je proizvodu između mase molekula M i njegovog ubrzanja: $M\ddot{u}_n = F_n$. Na osnovu (III.17) i (III.18) sledi:

$$M\ddot{u}_n = C(u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n) \Rightarrow \frac{M}{C}\ddot{u}_n = u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n. \qquad \text{(III.19)}$$

Ovo je jednačina kretanja fononskog poremećaja. Kako pomeraj mora biti realan, uzećemo da je:

$$u_n(t) = \psi_n \cos\omega t;\ \psi_n = u_n(0);$$

što znači da je $\ddot{u}_n = -\omega^2\psi_n\cos\omega t.$ Ako se ovo uvrsti u izraz (III.19), dobija se sledeća diferencna jednačina:

$$\psi_{n+1} + \psi_{n-1} + \left(\frac{M\omega^2}{C} - 2\right)\psi_n = 0. \qquad \text{(III.20)}$$

U slučaju idealne (translaciono invarijantne) strukture, pod normalnim pritiskom, veličina $\frac{M\omega^2}{C} \equiv \rho$ ne zavisi od indeksa čvora *n*. Ako u graničnim delovima lanca dođe do njegovog sabijanja i to tako da međumolekulsko rastojanje eksponencijalno opada ka drugom kraju lanca, onda se može uzeti da se Hukova konstanta ponaša po zakonu:

$$C = C_0\,\mathrm{e}^{-\alpha n},$$

što znači da se ρ može napisati u obliku $A(\omega)\mathrm{e}^{\alpha n}$, gde je $A(\omega) = \frac{M\omega^2}{C} = \frac{\omega^2}{\Omega_D^2}$, a $\Omega_D = \sqrt{\frac{C_0}{M}}$. Na osnovu ovoga

 ISBN 978-86-7466-930-3

jednačina (III.20) postaje:

$$\psi_{n+1} + \psi_{n-1} + \left[A(\omega)\mathrm{e}^{\alpha n} - 2\right]\psi_n = 0, \qquad \text{(III.21)}$$

i ona je po obliku identična sa (III.15). Prema tome, rešenje tipa (III.16) može se koristiti za izračunavanje molekulskih pomeraja u 1D lancu u kome su molekuli na jednom kraju sabijeni.

IV. Elektroni u ultratankim filmovima

Na konferencijama ETRAN još od početka ovog veka predstavljali smo različite metode za analizu sistema elementarnih pobuđenja uglavnom u ultratankim kristalnim filmovima, npr. fonone i termodinamičke osobine 2003. – 2021., eksitone i optička svojstva 2004. – 2013, te elektrone i provodnost 2003. – 2013. Ovde ćemo demonstrirati primenu izložene teorije na elektronski sistem, a u posebnom radu i eksitonsku difuziju u modelu filma sa nanoskopskom debljinom.

A. Model elektrona u ultratankom metalnom filmu

Ultratanki metalni filmovi (UTF) jesu strukture sa narušenom simetrijom, pa se kao glavni problem analize UTF pojavljuje problem korektnog nalaženja Grinove funkcije (GF) filma. Kako je već ranije napomenuto, ovaj problem nije trivijalan, jer GF u strukturi sa narušenom simetrijom duž jednog pravca zavise od dva prostorna indeksa ponaosob, a ne od njihove razlike kao u balk-strukturi [31,32]. Zbog toga je cillj ove analize razvijanje takve tehnike sa GF koja će korektno reprodukovati karkateristike konkretnog UTF.

U analizi elektrona u UTF, koristićemo uprošćeni Habardov model [34,35], uzet u aproksimaciji najbližih suseda. Pretpostavićemo da je film „isečen“ iz idealne proste kubne stukture, pa hamiltonijan ovog podsistema ima oblik:

$$H = \sum_{\vec{n},\vec{\lambda}} W_{\vec{n},\vec{n}+\vec{\lambda}} A^{+}_{\vec{n}} A_{\vec{n}} - \sum_{\vec{n},\vec{\lambda}} W_{\vec{n},\vec{n}+\vec{\lambda}} A^{+}_{\vec{n}+\vec{\lambda}} A_{\vec{n}} + \sum_{\vec{n},\vec{\lambda}} W_{\vec{n},\vec{n}+\vec{\lambda}} A^{+}_{\vec{n}} A_{\vec{n}+\vec{\lambda}}. \qquad \text{(IV.1)}$$

U ovoj formuli W predstavlja energiju elektronskog transfera, tj. jon-jon interakciju, vektor $\vec{\lambda}$ spaja najbliže susede sa onim koji se nalazi u tački rešetke označenoj sa $\vec{n}$, a Fermi operatori A^{+} i A kreiraju i anihiliraju elektrone, respektivno. Dakle, UTF je tanslaciono invarijantan u XY ravnima, a simetrija je narušena samo u z-pravcu. U skladu sa ovim, vrednosti ideksa n_x, n_y i n_z kreću se u sledećim intervalima:

$$-\frac{N_i}{2} + 1 \le n_i \le \frac{N_i}{2};\ N_i \sim 10^8;\ i = x, y;$$
$$n_z = 0, 1, 2, \cdots, N_z;\ N_z \le 10.$$

B. GF i korelaciona funkcija ultratankog metalnog filma

U analizi biće korišćena antikomutatorska GF [24,12–14]:

$$G_{\vec{n},\vec{m}}(t) \equiv \left\langle\left\langle A_{\vec{n}} \,\middle\|\, A^{+}_{\vec{m}} \right\rangle\right\rangle = \theta(t)\left\langle\left\{A_{\vec{n}}, A^{+}_{\vec{m}}\right\}\right\rangle, \qquad \text{(IV.2)}$$

gde je $\theta(t)$ Hevisajdova step-funkcija ($\theta = 0$, za $t < 0$ i $\theta = 1$, za $t > 0$). Diferencirajući po vremenu (IV.2) uz korišćenje jednačina kretanja dolazimo do sledeće jednačine:

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{d}{dt}G_{n_x,n_y,n_z;m_x,m_y,m_z}(t) &= i\hbar\delta(t)\delta_{n_x,m_x}\delta_{n_y,m_y}\delta_{n_z,m_z} + 6W G_{n_x,n_y,n_z;m_x,m_y,m_z}(t) - \\ &- W\big[G_{n_x+1,n_y,n_z;m_x,m_y,m_z}(t) + G_{n_x-1,n_y,n_z;m_x,m_y,m_z}(t) + G_{n_x,n_y+1,n_z;m_x,m_y,m_z}(t) + \\ &+ G_{n_x,n_y-1,n_z;m_x,m_y,m_z}(t) + G_{n_x,n_y,n_z+1;m_x,m_y,m_z}(t) + G_{n_x,n_y,n_z-1;m_x,m_y,m_z}(t)\big] \end{aligned} \qquad \text{(IV.3)}$$

U ovoj jednačini biće izvršene Furije-tansformacije vreme – frekvencija: $G_{n_x,n_y,n_z;m_x,m_y,m_z}(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega\, \mathrm{e}^{-i\omega t} G_{n_x,n_y,n_z;m_x,m_y,m_z}(\omega)$;

$\delta(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \mathrm{e}^{-i\omega t}$; $\hbar\omega = E$, nakon čega ona prelazi u:

$$\begin{aligned} (E - 6W)\, G_{n_x,n_y,n_z;m_x,m_y,m_z}(\omega) &= \frac{i\hbar}{2\pi}\delta_{n_x,m_x}\delta_{n_y,m_y}\delta_{n_z,m_z} - \\ -W\big[G_{n_x+1,n_y,n_z;m_x,m_y,m_z}(\omega) &+ G_{n_x-1,n_y,n_z;m_x,m_y,m_z}(\omega) + G_{n_x,n_y+1,n_z;m_x,m_y,m_z}(\omega) + \\ + G_{n_x,n_y-1,n_z;m_x,m_y,m_z}(\omega) &+ G_{n_x,n_y,n_z+1;m_x,m_y,m_z}(\omega) + G_{n_x,n_y,n_z-1;m_x,m_y,m_z}(\omega)\big] \end{aligned} \qquad \text{(IV.4)}$$

Na ovom mestu moramo uzeti u obzir da je simetrija narušena u z-pravcu, što znači da u račun moramo uvesti granične uslove u ovom pravcu, a koristićemo najjedostavnije – koji su u odsustvu slojeva za $n_z = -1$ i $n_z = N_z + 1$ jednaki:

$$W_{n_x,n_y,0;m_x,m_y,-1} = W_{n_x,n_y,N_z+1;m_x,m_y,N_z} = 0\,.$$

Treba naglasiti da realističniji granični uslovi treba da uključe promene interakcija u graničnim slojevima i promenu interakcija između graničnog sloja i prvog unutrašnjeg sloja. Ovi opštiji granični uslovi bili su korišćeni u analizi sistema Frenkelovih eksitona [24,34,35]. U skladu sa usvojenim graničnim uslovima jednačina (IV.4) raspada se na sistem od 3^{l} jednačina, gde je l broj pravaca narušenja simetrije (u razmatranom slučaju je $l = 1$), pa sledi:

$\underline{n_z = 0:}$

$$\begin{aligned} (E - 5W)\, G_{n_x,n_y,0;m_x,m_y,m_z} &= \frac{i\hbar}{2\pi}\delta_{0,m_x}\delta_{0,m_y}\delta_{n_z,m_z} - \\ &- W\left(G_{n_x+1,n_y,0;m_x,m_y,m_z} + G_{n_x-1,n_y,0;m_x,m_y,m_z}\right) - \\ &- W\left(G_{n_x,n_y+1,0;m_x,m_y,m_z} + G_{n_x,n_y-1,0;m_x,m_y,m_z}\right) - \\ &- W G_{n_x,n_y,1;m_x,m_y,m_z}; \end{aligned} \qquad \text{(IV.5a)}$$

$\underline{1 \le n_z \le N_z - 1:}$

$$\begin{aligned} (E - 6W)\, G_{n_x,n_y,n_z;m_x,m_y,m_z} &= \frac{i\hbar}{2\pi}\delta_{n_x,m_x}\delta_{n_y,m_y}\delta_{n_z,m_z} - \\ &- W\left(G_{n_x+1,n_y,n_z;m_x,m_y,m_z} + G_{n_x-1,n_y,n_z;m_x,m_y,m_z}\right) - \\ &- W\left(G_{n_x,n_y+1,n_z;m_x,m_y,m_z} + G_{n_x,n_y-1,n_z;m_x,m_y,m_z}\right) - \\ &- W\left(G_{n_x,n_y,n_z+1;m_x,m_y,m_z} + G_{n_x,n_y,n_z-1;m_x,m_y,m_z}\right); \end{aligned} \qquad \text{(IV.5b)}$$

$\underline{n_z = N_z:}$

$$\begin{aligned} (E - 5W)\, G_{n_x,n_y,N_z;m_x,m_y,m_z} &= \frac{i\hbar}{2\pi}\delta_{n_x,m_x}\delta_{n_y,m_y}\delta_{N_z,m_z} - \\ &- W\left(G_{n_x+1,n_y,N_z;m_x,m_y,m_z} + G_{n_x-1,n_y,N_z;m_x,m_y,m_z}\right) - \\ &- W\left(G_{n_x,n_y+1,N_z;m_x,m_y,m_z} + G_{n_x,n_y-1,N_z;m_x,m_y,m_z}\right) - \\ &- W G_{n_x,n_y,N_z-1;m_x,m_y,m_z}. \end{aligned} \qquad \text{(IV.5c)}$$

Imajući u vidu da je film translatorno invarijantan u svim XY ravnima izvršićemo delimičnu transformaciju prostor-impuls:

 ISBN 978-86-7466-930-3

$$G_{n_x,n_y,n_z;m_x,m_y,m_z}(\omega)=\frac{1}{N_xN_y}\sum_{k_xk_y}\mathrm{e}^{iak_x(n_x-m_x)+iak_y(n_y-m_y)}G_{k_x,k_y}(\omega)\,\alpha_{n_z,m_z}(\omega),$$

sa Kronekerovim simbolima u reprezentaciji ravnih talasa:

$$\delta_{n_x;m_x}=\frac{1}{N_x}\sum_{k_x}\mathrm{e}^{iak_x(n_x-m_x)};\ \ \delta_{n_y;m_y}=\frac{1}{N_y}\sum_{k_y}\mathrm{e}^{iak_y(n_y-m_y)},$$

gde je a kostanta kristalne rešetke. Posle zamena ovih transformacija ovaj sistem jednačina se uprošćava i postaje:

$n_z=0$:

$$G_{k_x,k_y}\left[W\alpha_{1,m_x}+(\varepsilon+W)\alpha_{0,m_x}\right]=\frac{i\hbar}{2\pi}\delta_{0,m_z};\tag{IV.6a}$$

$1\le n_z\le N_z-1$:

$$G_{k_x,k_y}\left[W\left(\alpha_{n_z+1,m_x}+W\alpha_{n_z-1,m_x}\right)+\right.\left.+\varepsilon\alpha_{n_z,m_z}\right]=\frac{i\hbar}{2\pi}\delta_{n_z,m_z};\tag{IV.6b}$$

$n_z=N_z$:

$$G_{k_x,k_y}\left[W\alpha_{Nz-1,m_x}+(\varepsilon+W)\alpha_{N_z,m_x}\right]=\frac{i\hbar}{2\pi}\delta_{N_z,m_z},\tag{IV.6c}$$

gde je: $\varepsilon=E-2W-4W\sin^2\frac{ak_x}{2}-4W\sin^2\frac{ak_y}{2}$. Funkciju α podobno je uzeti u sledećem obliku:

$$\alpha_{n_z,m_z}(\omega)=\sum_\nu a_\nu(m_z,\omega)\left[\sin(n_z+1)\varphi_\nu-\sin n_z\,\varphi_\nu\right],$$

u kojem se nepoznate funkcije određuju tako da granične jednačine (IV.6a) i (IV.6c) budu zadovoljene. Ako se ovo zameni u (IV.6b) dobija se:

$$\sum_\nu G_{k_x,k_y}(2W\cos\varphi_\nu+\varepsilon)\,a_\nu\times\times\left[\sin(n_z+1)\varphi_\nu-\sin n_z\varphi_\nu\right]=\frac{i\hbar}{2\pi}\delta_{n_z,m_z},\tag{IV.7}$$

a zamenom u (IV.6a), ona postaje:

$$\sum_\nu G_{k_x,k_y}(2W\cos\varphi_\nu+\varepsilon)\,a_\nu\,\sin\varphi_\nu=\frac{i\hbar}{2\pi}\delta_{0,m_z}.$$

Lako se uočava da ova jednačina predstavlja specijalan slučaj jednačine (IV.7) za nultu vrednost indeksa n_z. Ako se izraz za $\alpha_{n_z,m_z}(\omega)$ zameni u (IV.6c), dobija se jednačina koja predstavlja specijalan slučaj izraza (IV.7) za $n_z=N_z$, pod uslovom:

$$(1-\cos\varphi_\nu)\sin(N_z+1)\varphi_\nu=0\ \ \Rightarrow\ \ \varphi_\nu=\frac{\nu\pi}{N_z+1},\tag{IV.8}$$

gde je $\nu=1,2,3,\ldots,N_z$.

Konačan izraz za GF onda postaje:

$$G_{n_x,n_y,n_z;m_x,m_y,m_z}(\omega)=\frac{i}{2\pi}\frac{1}{N_x}\frac{1}{N_y}\sum_{k_x}\sum_{k_y}\sum_{\nu=1}^{N_z}\frac{\mathrm{e}^{iak_x(n_x-m_x)+iak_y(n_y-m_y)}}{\omega-\omega_{k_x,k_y,\nu}}\times\times\left[\sin(n_z+1)\frac{\nu\pi}{N_z+1}-\sin n_z\frac{\nu\pi}{N_z+1}\right]\sum_{\nu'=1}^{N_z}L^z_{\nu\nu'}\sin(m_z+\nu')\frac{\nu\pi}{N_z+1},\tag{IV.9}$$

a koeficijenti $L^z_{\nu\nu'}$ određuju se iz algebarske jednačine:

$$\delta_{n_z,m_z}=\sum_{\nu=1}^{N_z}\left[\sin(n_z+1)\frac{\nu\pi}{N_z+1}-\sin n_z\frac{\nu\pi}{N_z+1}\right]\times\times\sum_{\nu'=1}^{N_z}L^z_{\nu\nu'}\sin(m_z+\nu')\frac{\nu\pi}{N_z+1},$$

tako da ona bude zadovoljena kada je: $\delta_{n_z,m_z}=1$ za $n_z=m_z$ i $\delta_{n_z,m_z}=0$ za $n_z\neq m_z$.

Na osnovu definicije, npr. iz [36], spektralna intenzivnost elektronske GF će biti:

$$I_G=\left.\frac{G(\omega+i\delta)-G(\omega-i\delta)}{\mathrm{e}^{\frac{\hbar\omega}{\Theta}}+1}\right|_{\delta\to0^+}=\tag{IV.10}$$

$$=\frac{1}{N_x}\frac{1}{N_y}\sum_{k_x}\sum_{k_y}\sum_{\nu=1}^{N_z}\frac{\mathrm{e}^{iak_x(n_x-m_x)+iak_y(n_y-m_y)}}{\mathrm{e}^{\frac{\hbar\omega}{\Theta}}+1}\delta\left(\omega-\omega_{k_x,k_y,\nu}\right)\times$$

$$\times\left[\sin(n_z+1)\frac{\nu\pi}{N_z+1}-\sin n_z\frac{\nu\pi}{N_z+1}\right]\sum_{\nu'=1}^{N_z}L^z_{\nu\nu'}\sin(m_z+\nu')\frac{\nu\pi}{N_z+1},$$

a ona je potrebna radi proračuna korelacione funkcije [12-14]:

$$\left\langle A^+_{m_x,m_y,m_z}(0)A_{n_x,n_y,n_z}(t)\right\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}d\omega\,\mathrm{e}^{-i\omega t}I_G(\omega)=\tag{IV.11}$$

$$=\frac{1}{N_x}\frac{1}{N_y}\sum_{k_x}\sum_{k_y}\sum_{\nu=1}^{N_z}\frac{\mathrm{e}^{-i\omega_{k_x,k_y,\nu}t}}{\mathrm{e}^{\frac{E_{k_x,k_y,\nu}}{\Theta}}+1}\mathrm{e}^{iak_x(n_x-m_x)+iak_y(n_y-m_y)}\times$$

$$\times\left[\sin(n_z+1)\frac{\nu\pi}{N_z+1}-\sin n_z\frac{\nu\pi}{N_z+1}\right]\cdot\sum_{\nu'=1}^{N_z}L^z_{\nu\nu'}\sin(m_z+\nu')\frac{\nu\pi}{N_z+1},$$

gde je:

$$E_{k_x,k_y,\nu}\equiv\hbar\omega_{k_x,k_y,\nu}=4W\left(\sin^2\frac{ak_x}{2}+\sin^2\frac{ak_y}{2}+\sin^2\frac{\nu}{N_z+1}\frac{\pi}{2}\right).\tag{IV.12}$$

energija elektronskih stanja.

C. Elektronske koncentracije u uskom sloju oko E_F

Izraz za elektronsku koncentraciju dobija se preko (IV.11) ako se uzme $t=0$ i $m_i=n_i$, $i=x,y,z$. Međutim, elektronske koncentracije moraju se računati u reprezentaciji hemijskog potencijala, tj. po statističkim formulama velikog kanonskog ansambla, zbog toga što se broj elektrona u sistemu održava. Hemijski potencijal biće uzet [13,24] kao najveća vrednost energije elektronskih stanja u prvoj Briluenovoj zoni [14], tj.

$$\mu=\left(E_{k_x,k_y,\nu}\right)_{\max}=4W\left(2+\sin^2\frac{N_z}{N_z+1}\frac{\pi}{2}\right).$$

Vodeći računa o ovoj napomeni, u (IV.11) mora se izvršiti zamena $E_{kx,ky,\nu}\rightarrow E_{kx,ky,\nu}-\mu$. Osim toga, elektroni koji se nalaze u uskom impulsnom sloju oko Fermi-površi najaktivniji su u fizičkim procesima [12,13], pa ćemo odrediti koncentracije u ovom sloju i to u formi:

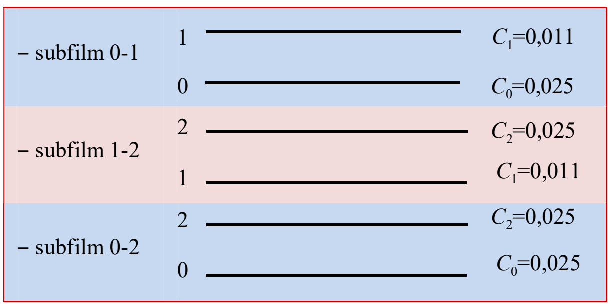
$$C_{n_z}\equiv\left\langle A^+_{n_x,n_y,n_z}(0)A_{n_x,n_y,n_z}(0)\right\rangle.\tag{IV.13}$$

 ISBN 978-86-7466-930-3

s´tim da se sumiranje po k_x i k_y zamenjuje odgovarajućom integracijom: $\frac{1}{N_x}\frac{1}{N_y}\sum_{k_x}\sum_{k_y} \to \frac{a^2}{(2\pi)^2}\iint dk_x dk_y$ u aproksimaciji malih talasnih vektora.

Posmatraćemo ilustrativni primer: troslojni film (film sa tri *XY* paralelne neograničene kristalografske ravni – dve granične i jedna u sredini filma), dakle $N_z = 2$.

Na osnovu prethodnih rezultata upadljivo je da impulsni indeks ν uzima jednu vrednost manje nego konfiguracioni indeks n_z. Za izabrani primer: $n_z \in [0,1,2]$, dok $\nu \in [1,2]$. To fizički znači da u jednom sloju troslojnog filma nema provodnih elektrona sa zakonom disperzije (IV.12). U ovom slučaju elektroni ostaju lokalizovani ili se, eventualno, film jonizuje tako što elektroni iz jednog sloja napuste film. Na osnovu ovoga očigledno je da se troslojni film ponaša kao jedan od tri navedena subfilma. Ti subfilmovi su: subfilm sa $n_z = 0$ i $n_z = 1$ (u daljem tekstu oznaka 0-1), subfilm sa $n_z = 1$ i $n_z = 2$ (oznaka 1-2) i subfilm sa $n_z = 0$ i $n_z = 2$ (oznaka 0-2). Za svaki od pomenutih subfilmova ćemo izračunati koncentracije elektrona uz podatke da je: $W = 1{,}885 \cdot 10^{-19}$ J, a temperatura sobna, dakle: $\Theta = k_B T = 4{,}14 \cdot 10^{-21}$ J. Na osnovu ovoga, izračunali smo raspodelu koncentracija uzduž (nano)debljine filma za:



Rezultati analize pokazuju da se troslojni metalni film ponaša kao dvoslojni, jer se provodni elektroni pojavljuju samo u dva sloja. Za troslojni film postoje tri dvoslojna subfilma i to 0-1, 1-2 i 0-2, pri čemu su 0-1 i 1-2 fizički identični. Pošto su ti subfilmovi isti, verovatnoća njihovog pojavljivanja u eksperimentu iznosi 2/3, dok verovatnoća pojavljivanja filma 0-2 iznosi 1/3.

U svim subfilmovima zapaža se skin efekt. Kod subfilmova 0-1 i 1-2 skin efekt je asimetričan, dok je kod subfilma 0-2 simetričan. Skin efekt kod subfilma 0-2 može se nazvati pravim skin efektom, jer su koncentracije na granicama jednake, a u srednjem sloju nema provodnih elektrona. Mišljenje je da ova varijanta subfilma ima najbolje aplikativne perspektive.

V. Zaključak

Teorijsko izučavanje stuktura velikih dimenzija uglavnom zahteva rešavanje diferencijalnih jednačina sa konstantnim koeficijentima. U istraživanjima nanostruktura javljaju se difrerencne jednačine, ali i njihovi koeficijenti zavise od prostornih koordinata zbog neophodnosti da se u račun uvedu granični uslovi, kao i uticaj vakancija i primesa. Zbog povećanog interesovanja za ove probleme naša namera je da doprinesemo ovoj tematici. Cilj je da se prikaže kompletna tehnika izračunavanja diferencnih jednačina i demonstrira primena diferencnog računa u analizama fizičkih karakteristika savremenih nanostruktura.

Udarni trend ovog rada je čisto operativan, tj. ima za cilj da se razvije sposobnost za opisivanje i rešavanje konkretnih problema uvođenjem teorije diferencnog računa. Matematički fundamenti diferencnog računa u vidu korolara, teorema i komplikovanih dokaza nekih stavova ispušteni su jer se sve to može naći u predloženoj matematičkoj literaturi. Treba još napomenuti da se za niz rešenja različitih problema lako dokazuje da ona stvarno zadovoljavaju početnu jednačinu. Ovo je učinjeno prvenstveno zbog toga da se čitalac privikne na operativnu tehniku diferencnog računa. Najčešće korišćena matematička struktura u rešavanju problema diferencnog računa je ovde zastupljena uvođenjem translacionih operatora, jer se njihovim korišćenjem najefikasnije dolazi do rešenja opisanog problema. Dakle, ova prikazana teorija daje neophodno oruđe istraživačima – teoretičarima kako bi se iznašla odgonetka na pitanja kako i zašto dolazi do tako drastičnih izmena svojstava struktura kada se oni proizvedu sa nano-dimenzijama.

Najveći doprinos ove teorije diferencija i antidiferencija je mogućnost opisivanja vrlo specifičnih i bitno različitih osobina nanoskopskih u odnosu na balkovske kristalne strukture. Na konferencijama ETRAN još od početka ovog veka predstavljali smo različite metode za analizu sistema elementarnih pobuđenja uglavnom u ultratankim kristalnim filmovima i njihove karakteristične osobine, a ovde smo demonstrirali primenu izložene teorije na elektronski i eksitonski sistem. Od rezultata treba istaći upečatljiv skin-efekat i različitu prostornu distribuciju i različitu koncentraciju elementarnih pobuđenja.

Zahvalnica

Za ovako bogatu teoriju diferencija i antidiferencija, kao i diferencnih jednačina, najzaslužniji je pokojni akademik, prof. dr Bratislav Tošić (1935–2010).

Ovaj rad je finansijski podržan od strane Ministarstva za naučnotehnološki razvoj, visoko obrazovanje i informaciono društvo Republike Srpske (Projekti br. 19.032/961-36/19 i 19.032/961-42/19).

Literatura

[1] G. Cao, *Nanostructures and Nanomaterials: Synthesis, Properties and Applications*, 2nd ed. London, UK: Imperial College Press, 2004.
[2] E.L. Wolf, *Nanophysics and Nanotechnology*, 2nd ed. Weinheim, UK: Wiley-VCH, 2006.
[3] R.W. Kelsall, I.W. Hamley, M. Geoghegan (Eds.), *Nanoscale Science and Technology*, Chichester, UK: J. Wiley & Sons, 2005.
[4] A.G. Davies, J.M.T. Thompson (Eds.), *Advances in Nanoengineering – Electronics, Materials and Assembly*, London, UK: Imperial College, 2007.
[5] C.N.R. Rao, P.J. Thomas, G.U. Kulkarni, *Nanocrystals: Synthesis, Properties and Applications*, New York, USA: Springer, 2007.
[6] S.N. Elaydi, S. Axler, F.W. Gehring, K.A. Ribet, *An Introduction to Difference Equations*, Berlin, Germany: Springer, 1999.
[7] S. Goldberg, *Introduction to Difference Equations*, New York, USA: Dover, 1986.
[8] J.J. Abdul, *Linear Difference Equations with Discrete Transforms Method*, London, UK: Clarkson University, Kluwer AP, 1996.
[9] R.P. Agarwal, *Difference Equations and Inequalities: Theory, Methods and Applications*, New York, USA: Marcel Dekker, 2000.
[10] L. Brand, *Differential and Difference Equations*, New York, USA: John Wiley, 1966.

 ISBN 978-86-7466-930-3

[11] L.M. Milne-Thomson, *The Calculus of Finite Differences*, London, UK: Macmillan, 1960.

[12] B.S. Tošić, V.D. Sajfert, J.P. Šetrajčić, D. Popov, D. Ćirić, *Primena diferencnog računa u analizi nanostruktura*, Novi Sad Srbija: Vojvođanska akademija nauka i umetnosti, 2005.

[13] B.S. Tošić, J.P. Šetrajčić i S.K. Jaćimovski, *Metodi teorijske fizike*, Zemun – Beograd, Srbija: Kriminalističko-policijska akademija, 2018.

[14] V.D. Sajfert and 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, Singapore, Singapore: World Scientific, 2022.

[15] J.D. Watson and F.H.S. Crick, "Molecular Structure of Nucleic Acids: A Structure for Deoxyribose Nucleic Acid", *Nature*, vol. 171, pp. 737-738, 1953.

[16] V.M. Agranovich, *Theory of Excitons*, Moscow, SSSR: Nauka, 1978.

[17] A.J. Šetrajčić-Tomić, D. Rodić, I.J. Šetrajčić, V.D. Sajfert and J.P. Šetrajčić, "Basics of Optical Engineering – Analysis of Environmental and Quantum Size Effects on the Optical Characteristics of Molecular Crystalline Nanofilms", *Photonic Nanostruct*. vol. 31, pp. 115–128, 2018.

[18] A.J.Šetrajčić-Tomić, M. Vojnović, J.P. Šetrajčić, S.M. Vučenović and N.R. Vojnović, "Theoretical Basis of Optical Engineering of Ultrathin Crystalline Film-Structures", *Opt. Quant. Electron.* vol. 52, no 4, 251 [1-18], 2020).

[19] L. Edelstein-Keshet, *Mathematical Models in Biology*, New York, USA: Random House, 1988.

[20] J.P. Šetrajčić, S. Armaković, I.J. Šetrajčić and Lj.D. Džambas, "Surface Localization of Electrons in Ultrathin Crystalline Structures", *Mod. Phys. Lett*. B, vol. 28, no.), 1450023 [8 pages], 2014.

[21] J.P.Šetrajčić, S.K.Jaćimovski i S.M.Stojković, *Uticaj elektronskog podsistema na posebne odlike kristalnih nanostruktura*, Zemun – Beograd, Srbija: Kriminalističko-policijska akademija, 2018.

[22] J.P. Šetrajčić, D.I.Ilić and S.K.Jaćimovski, "The Influence of the Surface Parameter Changes onto the Phonon States in Ultrathin Crystalline Films", *Physica* A vol. 496, pp. 434-445, 2018.

[23] J.P. Šetrajčić, D.I. Ilić, S.K. Jaćimovski and S.M. Vučenović, "Impact of Surface Conditions Changes on Changes in Thermodynamic Properties of Quasi 2D Crystals", *Physica* A vol. 566, pp. 125650, 2021.

[24] Ch. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, New York, USA: Wiley, 2004.

[25] P. Hoffmann, *Solid State Physics*, New York, USA: Wiley, 2015.

[26] S.M. Girvin and K. Yang, *Modern Condensed Matter Physics*, Cambridge, UK: Cambridge Univ. Press, 2019.

[27] V.D. Sajfert, B.S. Tošić, "The Research of Nanoscience Progress", *J. Comput. Theor. Nanosci*. vol. 7, no. 1, pp. 15–84, 2010.

[28] V.D. Sajfert, B.S. Tošić, "Order–Disorder Excitations in Nanostructures", in: *Encyclopedia of Nanoscience and Nanotechnology*, vol. 20, pp. 281–350, 2011. (American Scientific Publishers, Ed. H.S. Nalwa, Valencia, California 2011).

[29] J.P. Šetrajčić, V.D. Sajfert, S.K. Jaćimovski, "Fundamental Preferences of the Phonon Engineering for Nanostructural Samples", *Rev. Theor. Sci.* vol. 4, no. 4, pp. 353-401, 2016.

[30] V.D. Sajfert, J.P. Šetrajčić, S.K. Jaćimovski, D.Popov, "Theoretical Basis for Phonon Engineering of Nanostructures", *Quantum Matter*, vol. 6, no. 1, pp. 18-27, 2017.

[31] V.D. Sajfert, J.P. Šetrajčić, B.S. Tošić, R.P. Đajić," Excitonic Diffusion in Thin Molecular Films", *Czechoslovak J.Phys*. vol. 54, no. 9, pp. 975-988, 2004.

[32] V.D. Sajfert, J.P. Šetrajčić, S.K. Jaćimovski, B.S. Tošić, "Thermodynamic and Kinetic Properties of Phonons in Cylindrical Quantum Dots", *Physica* E, vol. 353, pp. 479-491, 2005.

[33] H. Ibach and H. Lüth, *Solid State Physics, An Introduction to Principles of Material Science*, 4th ed. Berlin, Germany: Springer Nature, 2009.

[34] S. Doniach and E.H. Sondheimer, *Green's Functions for Solid State Physisists*, London, UK: Imperial College Press, 1999.

[35] G. Strobl, *Condensed Matter Physics, Crystals, Liquid Crystals and Polymers,* Berlin, Germany: Springer, 2004

[36] D. Popov, S.K. Jaćimovski, B.S. Tošić, J.P. Šetrajčić, "Kinetics of Thin Films Mechanical Oscillations", *Physica* A, vol. 317, pp. 129-139, 2003.

ABSTRACT

The trend of rapid development of nanotechnologies is caused by the discovery of nanostructures – materials that have significantly different physical characteristics when compared with large structures (balk). Nanostructures also have a series of qualitatively completely new and changed effects. For example, superconductive, thermal insulation, acoustic and other properties of nanomaterials are better or completely different from those properties in bulk structures. In general, the potential application in innovative pharmacy and medicine is particularly intriguing. In a way, differences between effects in nanostructures and massive structures can be compared to differences between quantum and classical effects. Theoretical study of balk structures generally requires solving differential equations with continuous variables. In the study of mechanisms in nanostructures, which are the culprits of drastic changes in their properties, differential equations have discrete variables. This is caused by the fact that coefficients depend on spatial coordinates due to the need to calculate dimensional – quantum and boundary (confinement) conditions, as well as the influence of vacancies and impurities. Due to increased interest and high expectations for the benefits of newly discovered effects, and especially due to undeveloped theory, we have presented a theory that aims to present the technique of calculating differential equations and to demonstrate this in a series of applications in the analysis of different – discovered and more undiscovered physical properties of nanostructures.Ovde dolazi prevod apstrakta na engleski. Srpski i engleski tekst apstrakta moraju se slagati.

Fundamentals of the Theory of Difference Equations Applied to the Analysis of the Properties of Nanostructures

Jovan P. Šetrajčić,
Vjekoslav D. Sajfert, Siniša M. Vučenović

 ISBN 978-86-7466-930-3