

UNIVERZITET U NOVOM SADU  
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET  
*INSTITUT ZA FIZIKU*

УНИВЕРЗИТЕТ У НОВОМ САДУ  
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ

ПРИМЉЕНО:	28 ЈУЛ 2003
ОРГАНИЗЈЕД:	БРОЈ
0603	9/346

- D I P L O M S K I R A D -

EKSITONSKA STANJA U  
BIMOLEKULSKIM KRISTALNIM FILMOVIMA

M E N T O R

PROF. DR JOVAN ŠETRAJČIĆ

K A N D I D A T

LAZAR RUTONJSKI

Novi Sad, 2003. godine

## Predgovor

Pored mehaničkih, električnih i magnetnih svojstava, supstancije se odlikuju i posebnim optičkim osobinama. Nauka o materijalima definiše specifična elementarna pobudjenja u kondenzovanom stanju – eksitone, kao nosioce dielektričnih, optičkih (apsorpcija, disperzija svetlosti, luminescencija), fotoelektričnih i drugih karakteristika (uglavnom) molekulskih kristala.

Savremena nauka istražuje mogućnost „pojačavanja“ određenih (potrebnih) i „prigušivanje“ drugih (nepotrebnih) fizičkih osobina. U tu svrhu su posebno ispitivani niskodimenzionalni kristalni sistemi (ultratanki filmovi, superrešetke, te kvantne žice i tačke).

Današnji razvoj tehnike i tehnologije omogućava pravljenje ovakvih kvantnih sistema. Ekperimentalni rezultati su prisutni i merna oprema može da ih prati, ali se u domenu teorijskih razmatranja (modelovanja i analitičkog rešavanja) veoma se malo uradilo.

Najveća poteškoća je upravo u slabo i neadekvatno primenljivom matematičkom aparatuu. U ovom radu se pokazuje da se metode diferencnog računa uz odgovarajuću podršku numeričkih proračuna mogu uspešno primeniti na iznalaženje zakona disperzije Frenkelovih eksitona u molekulskim filmovima sa složenom kristalnom rešetkom.

Ovaj diplomski rad je urađen pod mentorstvom prof. dr Jovana Šetrajčića.

Novi Sad, 27.07.2003.

Laza Rutonjski

## Sadržaj

<b>1</b>	<b>Uvod</b>	<b>4</b>
<b>2</b>	<b>Eksitoni u kristalu sa podrešetkom</b>	<b>5</b>
2.1	Grinove funkcije sistema . . . . .	5
2.2	Zakon disperzije bimolekulskog kristala . . . . .	8
<b>3</b>	<b>Eksitoni u bimolekulskim filmovima</b>	<b>10</b>
3.1	Model bimolekulskog filma . . . . .	10
3.2	Zakon disperzije eksitona . . . . .	11
<b>4</b>	<b>Zaključak</b>	<b>19</b>
<b>5</b>	<b>Dodatak: Eksitoni u molekulskim kristalima</b>	<b>20</b>
5.1	Eksitoni u kristalima . . . . .	20
5.2	Frenkelovi eksitoni . . . . .	22
<b>6</b>	<b>Literatura</b>	<b>24</b>

## 1 Uvod

Interes za izučavanjem eksitonskog podsistema javio se zbog činjenice da su upravo eksitoni odgovorni za dielektrična, optička (apsorpcija, disperzija svetlosti, luminescencija), fotoelektrična i druga svojstva kristala. Proučavanje ponašanja eksitona u kristalnim sistemima kulminiralo je otkrićem lasera.

Poslednjih godina veoma su intenzivna teorijska istraživanja kvazidvodimenzionih eksitonskih sistema (nanostrukture), naročito tankih filmova<sup>1</sup>, ne samo zbog fundamentalne informacije o dielektričnim osobinama materijala već i zbog njihove široke praktične primene (nanoelektronika i optoelektronika). Posebnost ovih struktura ogleda se u tome što prisustvo graničnih površina i pojava specijalnih perturbacionih uslova na tim granicama dovode do izmenjenih osobina ovih materijala i specifičnih pojava u odnosu na odgovarajuće masivne uzorke.

U ovom radu analiziran je uticaj prisustva granica film-strukture složene kristalne gradje na energetski spektar eksitona (eksitonski zakon disperzije). Posebna pažnja posvećena je pojavi lokalizovanih eksitonskih stanja. Dobijeni rezultati poredjeni su sa odgovarajućim rezultatima za idealne beskonačne kristale, da bi se na osnovu toga uočile najbitnije razlike ova dva sistema.

Pomenuta analiza vršena je korišćenjem metoda dvovremenskih temperaturski zavisnih Grinovih funkcija<sup>2</sup> koji se danas veoma često koristi u kvantnoj teoriji čvrstog stanja. Zahvaljujući ugradjenoj statistici, taj metod se uspešno primenjuje kod izračunavanja kako mikroskopskih tako i makroskopskih, ravnotežnih i neravnotežnih svojstava kristala. Primjenjeni metod je odabran zbog pogodnosti koje nam nudi definicija polova Grinovih funkcija<sup>3</sup>.

Ovde je najpre vršena analiza idealnih beskonačnih kristalnih struktura sa složenom rešetkom (sastavljena je od dve podrešetke), a zatim isti metod primenjen na film-strukture sa odgovarajućom rešetkom.

---

<sup>1</sup>Filmovi predstavljaju beskonačne strukture u svim kristalnim ravnima paralelnim dvema graničnim površima, koje su normalne na jedan prioriteten pravac, duž koga je posmatrani sistem ograničen.

<sup>2</sup>Postoje i drugi metodi pomoću kojih se ovaj problem može tretirati: metod Hajzenbergovih jednačina kretanja, metod malih perturbacija, metod talasnih funkcija i sl.

<sup>3</sup>Realni delovi polova Grinovih funkcija definišu energije elementarnih ekscitacija (pobudjenja) koje se javljaju u sistemu (odakle se dobija njihov zakon disperzije), dok su imaginarni delovi proporcionali recipročnim vrednostima vremena života tih ekscitacija.

## 2 Eksitoni u kristalu sa podrešetkom

U razmatranju svojstava eksitonskog podsistema u bimolekulskim kristalima, polazi se od modela idealnog beskonačnog kubnog molekulskog kristala sa standardnim eksitonskim hamiltonijanom koji u konfiguracionom prostoru ima oblik:

$$H = H_0 + \sum_{\vec{n}} \Delta_{\vec{n}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}} + \sum_{\vec{n}, \vec{m}} X_{\vec{n}\vec{m}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}} + \sum_{\vec{n}, \vec{m}} Y_{\vec{n}\vec{m}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}} P_{\vec{m}}^+ P_{\vec{m}}, \quad (2.1)$$

gde su  $P_{\vec{n}}^+$  i  $P_{\vec{n}}$  - kreacioni i anihilacioni operatori eksitona na čvoru  $\vec{n}$  kristalne rešetke. Veličina  $\Delta_{\vec{n}}$  - predstavlja energiju eksitona lokalizovanog na čvoru  $\vec{n}$ , a veličine  $X_{\vec{n}, \vec{m}}$  i  $Y_{\vec{n}, \vec{m}}$  - su matrični elementi eksitonskog transfera sa čvora  $\vec{n}$  na čvor  $\vec{m}$ .

### 2.1 Grinove funkcije sistema

Svojstva posmatranog eksitonskog sistema analiziraćemo pomoću komutatorske paulionske Grinove funkcije:

$$\Gamma_{\vec{n}\vec{m}}(t) = \langle \langle P_{\vec{n}}(t) | P_{\vec{m}}^+(0) \rangle \rangle = \Theta(t) \langle [P_{\vec{n}}(t), P_{\vec{m}}^+(0)] \rangle, \quad (2.2)$$

koja zadovoljava jednačinu kretanja:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \Gamma_{\vec{n}\vec{m}}(t) &= i\hbar \delta(t) \langle [P_{\vec{n}}(t), P_{\vec{m}}^+(0)] \rangle + \\ &+ \Theta(t) \langle [P_{\vec{n}}(t), H] P_{\vec{m}}^+(0) - P_{\vec{m}}^+(0) [P_{\vec{n}}(t), H] \rangle. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Korišćenjem komutatorskih relacija za Pauli-operatore:

$$[P_{\vec{n}}, P_{\vec{m}}^+] = (1 - 2P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}}) \delta_{\vec{n}\vec{m}}; \quad [P_{\vec{n}}, P_{\vec{m}}] = [P_{\vec{n}}^+, P_{\vec{m}}^+] = 0; \quad P_{\vec{n}}^2 = (P_{\vec{n}}^+)^2 = 0, \quad (2.4)$$

dobijamo:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \Gamma_{\vec{n}\vec{m}}(t) = i\hbar \delta(t) \delta_{\vec{n}\vec{m}} (1 - 2\langle P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}} \rangle) + F_{\vec{n}}, \quad (2.5)$$

gde su:

$$F_{\vec{n}} = \Theta(t) \langle [K_{\vec{n}}, P_{\vec{m}}^+(0)] \rangle = \sum_{i=0}^3 F_i(\vec{n}); \quad K_{\vec{n}} = [P_{\vec{n}}(t), H] = \sum_{i=0}^3 K_i(\vec{n}). \quad (2.6)$$

Pokazaćemo postupak izračunavanja gornjih veličina za, naprimjer,  $i = 2$  (ostali članovi sume dobijaju se analognim räčunanjem).

$$\begin{aligned} K_2(\vec{n}) &= \left[ P_{\vec{n}}(t), \sum_{\vec{k}\vec{l}} X_{\vec{k}\vec{l}} P_{\vec{k}}^+ P_{\vec{l}} \right] = \sum_{\vec{k}\vec{l}} X_{\vec{k}\vec{l}} [P_{\vec{n}}, P_{\vec{k}}^+] P_{\vec{l}} = \\ &= \sum_{\vec{k}\vec{l}} X_{\vec{k}\vec{l}} (1 - 2P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}}) \delta_{\vec{n}\vec{k}} P_{\vec{l}} = \sum_{\vec{l}} X_{\vec{n}\vec{l}} (1 - 2P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}}) P_{\vec{l}}. \end{aligned}$$

Na osnovu toga računamo:

$$\begin{aligned} F_2(\vec{n}) &= \Theta(t) \langle \left[ \sum_{\vec{l}} X_{\vec{n}\vec{l}} (1 - 2P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}}) P_{\vec{l}}, P_{\vec{m}}^+(0) \right] \rangle = \sum_{\vec{l}} X_{\vec{n}\vec{l}} \Theta(t) (\langle [P_{\vec{l}}, P_{\vec{m}}^+] \rangle - \\ &- 2\langle [P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}} P_{\vec{l}}, P_{\vec{m}}^+] \rangle) = \sum_{\vec{l}} X_{\vec{n}\vec{l}} \Gamma_{\vec{l}\vec{m}}(t) - 2 \sum_{\vec{l}} X_{\vec{n}\vec{l}} T_{\vec{n}\vec{n}\vec{l}\vec{m}}, \end{aligned}$$

gde je  $\mathcal{T}_{\vec{n}\vec{n}\vec{l}\vec{m}}(t) = \langle\langle P_{\vec{n}}^+(t)P_{\vec{n}}(t)P_{\vec{l}}(t) | P_{\vec{m}}^+(0)\rangle\rangle$  – paulionska Grinova funkcija višeg reda. Zamenom izračunatih veličina u (2.5) konačno dobijamo jednačinu kretanja za paulionsku Grinovu funkciju:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \Gamma_{\vec{n}\vec{m}}(t) &= i\hbar\delta(t)\delta_{\vec{n}\vec{m}} \left(1 - 2\langle P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}} \rangle\right) + \Delta_{\vec{n}} \Gamma_{\vec{n}\vec{m}}(t) + \\ &+ \sum_{\vec{l}} X_{\vec{n}\vec{l}} \Gamma_{\vec{l}\vec{m}}(t) - 2 \sum_{\vec{l}} X_{\vec{n}\vec{l}} \mathcal{T}_{\vec{n}\vec{n}\vec{l}\vec{m}}(t) + 2 \sum_{\vec{l}} Y_{\vec{n}\vec{l}} \mathcal{T}_{\vec{l}\vec{l}\vec{n}\vec{m}}(t). \end{aligned} \quad (2.7)$$

Osnovnu teškoću teorije eksitona predstavlja činjenica da Pauli-operatori  $P^+$  i  $P$  nisu ni Boze ni Fermi operatori, nego nekakav hibrid jednih i drugih sa kinematikom (2.4), koja je za jedan čvor fermionska, a za različite čvorove bozonska. Za precizne analize eksitonskih sistema, koje obuhvataju efekte medjueksitonske interakcije nije dovoljno samo zameniti Pauli-operatore sa Boze-operatorima. Zbog toga se u hamiltonijanu (2.1), Pauli-operatori zamenjuju svojim egzaktnim bozonskim reprezentima:

$$\begin{aligned} P &= \left[ \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-2)^{\nu}}{(1+\nu)!} (B^+)^{\nu} B^{\nu} \right]^{\frac{1}{2}} B; \quad P^+ = B^+ \left[ \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-2)^{\nu}}{(1+\nu)!} (B^+)^{\nu} B^{\nu} \right]^{\frac{1}{2}}; \\ P^+ P &= \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-2)^{\nu}}{(1+\nu)!} (B^+)^{\nu+1} B^{\nu+1}. \end{aligned} \quad (2.8)$$

Paulionske Grinove funkcije iz jednačine (2.7) mogu se izraziti preko odgovarajućih bozonskih Grinovih funkcija na osnovu aproksimativnih izraza koji slede iz (2.8):

$$P \approx B - B^+ BB; \quad P^+ \approx B^+ - B^+ B^+ B; \quad P^+ P \approx B^+ B - B^+ B^+ BB. \quad (2.9)$$

Na taj način dobijamo:

$$\begin{aligned} \Gamma_{\vec{n}\vec{m}}(t) &= \langle\langle P_{\vec{n}}(t) | P_{\vec{m}}^+(0)\rangle\rangle = \\ &= \langle\langle B_{\vec{n}}(t) | B_{\vec{m}}^+(0)\rangle\rangle - \langle\langle B_{\vec{n}}(t) | B_{\vec{m}}^+(0)B_{\vec{m}}^+(0)B_{\vec{m}}(0)\rangle\rangle - \\ &- \langle\langle B_{\vec{n}}^+(t)B_{\vec{n}}(t)B_{\vec{n}}(t) | B_{\vec{m}}^+(0)\rangle\rangle + \langle\langle B_{\vec{n}}^+(t)B_{\vec{n}}(t)B_{\vec{n}}(t) | B_{\vec{m}}^+(0)B_{\vec{m}}^+(0)B_{\vec{m}}(0)\rangle\rangle. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Dekuplovanjem viših Grinovih funkcija pomoću poznatih Boze-komutacionih relacija:

$$[B_{\vec{k}}, B_{\vec{l}}^+] = \delta_{\vec{k}\vec{l}}; \quad [B_{\vec{k}}, B_{\vec{l}}] = [B_{\vec{k}}^+, B_{\vec{l}}^+] = 0, \quad (2.11)$$

članovi u izrazu (2.10) postaju:

- prvi član

$$\langle\langle B_{\vec{n}}(t) | B_{\vec{m}}^+(0)\rangle\rangle = G_{\vec{n}\vec{m}}(t), \quad (2.12)$$

gde je  $G_{\vec{n}\vec{m}}(t)$  retardovana Grinova funkcija,

- drugi član

$$\begin{aligned} \langle\langle B_{\vec{n}}(t) | B_{\vec{m}}^+(0)B_{\vec{m}}^+(0)B_{\vec{m}}(0)\rangle\rangle &= \Theta(t) \langle [B_{\vec{n}}, B_{\vec{m}}^+ B_{\vec{m}}^+ B_{\vec{m}}] \rangle = \\ &= \Theta(t) \left( \langle (\delta_{\vec{n}\vec{m}} + B_{\vec{m}}^+ B_{\vec{n}}) B_{\vec{m}}^+ B_{\vec{m}} \rangle - \langle B_{\vec{m}}^+ B_{\vec{m}}^+ B_{\vec{m}} B_{\vec{n}} \rangle \right) = 2G_{\vec{n}\vec{m}}(t)\mathcal{N}_0, \end{aligned} \quad (2.13)$$

gde  $\mathcal{N}_0$  predstavlja koncentraciju eksitona:

$$\mathcal{N}_0 = \langle B^+ B \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \left( e^{\hbar\omega_0(\vec{k})/\theta} - 1 \right)^{-1}, \quad (2.14)$$

- treći član

$$\langle\langle B_{\vec{n}}^+(t)B_{\vec{n}}(t)B_{\vec{n}}(t) \mid B_{\vec{m}}^+(0)\rangle\rangle = 2G_{\vec{n}\vec{m}}(t)\mathcal{N}_0 , \quad (2.15)$$

- četvrti član

$$\langle\langle B_{\vec{n}}^+(t)B_{\vec{n}}(t)B_{\vec{n}}(t) \mid B_{\vec{m}}^+(0)B_{\vec{m}}^+(0)B_{\vec{m}}(0)\rangle\rangle = 2R_{\vec{n}\vec{m}}(t) G_{\vec{n}\vec{m}}^2(t) , \quad (2.16)$$

gde je  $R_{\vec{n}\vec{m}}(t)$  avansovana Grinova funkcija:

$$R_{\vec{n}\vec{m}}(t) = \langle\langle B_{\vec{n}}^+(t) \mid B_{\vec{m}}(0)\rangle\rangle . \quad (2.17)$$

Kada izraze (2.12), (2.13), (2.15) i (2.16) zamenimo u izraz (2.10) dobijamo konačan izraz za paulionsku Grinovu funkciju izraženu preko bozonskih Grinovih funkcija:

$$\Gamma_{\vec{n}\vec{m}}(t) = (1 - 4\mathcal{N}_0)G_{\vec{n}\vec{m}}(t) + 2R_{\vec{n}\vec{m}}(t)G_{\vec{n}\vec{m}}^2(t) + O(\mathcal{N}^2) . \quad (2.18)$$

Za paulionske Grinove funkcije višeg reda ( $T_{\vec{a}\vec{a}\vec{b}\vec{c}}$ ) na levoj strani Grinove funkcije prosti zamenimo Pauli operatore sa Boze-operatorima, a na desnoj strani se izvrši aproksimacija (2.9). Na taj način sledi:

$$\begin{aligned} T_{\vec{a}\vec{a}\vec{b}\vec{c}} &= \langle\langle P_{\vec{a}}^+(t)P_{\vec{a}}(t)P_{\vec{b}}(t) \mid P_{\vec{c}}^+(0)\rangle\rangle = \langle\langle B_{\vec{a}}^+(t)B_{\vec{a}}(t)B_{\vec{b}}(t) \mid B_{\vec{c}}^+(0)\rangle\rangle - \\ &- \langle\langle B_{\vec{a}}^+(t)B_{\vec{a}}(t)B_{\vec{b}}(t) \mid B_{\vec{c}}^+(0)B_{\vec{c}}^+(0)B_{\vec{c}}(0)\rangle\rangle = \\ &= \mathcal{N}_0 G_{\vec{b}\vec{c}}(t) + \mathcal{N}_{\vec{b}\vec{a}} G_{\vec{a}\vec{c}}(t) - 2R_{\vec{a}\vec{c}}(t)G_{\vec{b}\vec{c}}(t)G_{\vec{a}\vec{c}}(t) + O(\mathcal{N}_0^2) . \end{aligned} \quad (2.19)$$

Izraze za  $\Gamma_{\vec{n}\vec{m}}$ ,  $T_{\vec{n}\vec{n}\vec{l}\vec{m}}$ ,  $T_{\vec{l}\vec{l}\vec{n}\vec{m}}$ , koji su izraženi preko bozonskih Grinovih funkcija, ubacimo u jednačinu kretanja za paulionsku Grinovu funkciju (2.7):

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \left[ (1 - 4\mathcal{N}_0)G_{\vec{n}\vec{m}}(t) + 2R_{\vec{n}\vec{m}}(t)G_{\vec{n}\vec{m}}^2(t) \right] &= i\hbar\delta(t)\delta_{\vec{n}\vec{m}} \left( 1 - 2\langle P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}} \rangle \right) + \\ &+ \Delta_{\vec{n}} \left[ (1 - 4\mathcal{N}_0)G_{\vec{n}\vec{m}}(t) + 2R_{\vec{n}\vec{m}}(t)G_{\vec{n}\vec{m}}^2(t) \right] + \\ &+ \sum_{\vec{l}} X_{\vec{n}\vec{l}} \left[ (1 - 4\mathcal{N}_0)G_{\vec{l}\vec{m}}(t) + 2R_{\vec{l}\vec{m}}(t)G_{\vec{l}\vec{m}}^2(t) \right] - \\ &- 2 \sum_{\vec{l}} X_{\vec{n}\vec{l}} \left[ \mathcal{N}_0 G_{\vec{l}\vec{m}}(t) + \mathcal{N}_{\vec{l}\vec{n}} G_{\vec{n}\vec{m}}(t) - 2R_{\vec{n}\vec{m}}(t)G_{\vec{l}\vec{m}}(t)G_{\vec{n}\vec{m}}(t) \right] + \\ &+ 2 \sum_{\vec{l}} Y_{\vec{n}\vec{l}} \left[ \mathcal{N}_0 G_{\vec{n}\vec{m}}(t) + \mathcal{N}_{\vec{n}\vec{l}} G_{\vec{l}\vec{m}}(t) - 2R_{\vec{l}\vec{m}}(t)G_{\vec{n}\vec{m}}(t)G_{\vec{l}\vec{m}}(t) \right] . \end{aligned} \quad (2.20)$$

Gornju jednačinu ćemo rešavati u najnižoj aproksimaciji:

$$\mathcal{N}_0 \approx 0 ; \quad \mathcal{N}_{\vec{a}\vec{b}} \approx 0 ; \quad P \approx B ; \quad P^+ \approx B^+ ; \quad P^+P \approx B^+B ,$$

takodje je:

$$\langle P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}} \rangle \approx \langle B_{\vec{n}}^+ B_{\vec{n}} \rangle = \mathcal{N}_0 \approx 0$$

i proizvodi Grinovih funkcija:

$$G \cdot G \approx 0 ; \quad G \cdot R \approx 0 .$$

„Dekuplovana“ jednačina je tada:

$$i\hbar \frac{d}{dt} G_{\vec{n}\vec{m}}(t) = i\hbar\delta(t)\delta_{\vec{n}\vec{m}} + \Delta_{\vec{n}} G_{\vec{n}\vec{m}}(t) + \sum_{\vec{l}} X_{\vec{n}\vec{l}} G_{\vec{l}\vec{m}}(t) . \quad (2.21)$$

## 2.2 Zakon disperzije bimolekulskog kristala

Pod pojmom bimolekulske kristal podrazumeva se molekulski kristal sa podrešetkom, odnosno sa složenom kristalnom rešetkom – sastavljenom od dve podrešetke. Ona se dobija naizmeničnim „redjanjem“ molekula  $a$  i  $b$  (videti sliku 3.1 u sledećoj glavi) koji su u opštem slučaju različiti.

Radi nalaženja zakona disperzije u kristalima ovakvog tipa, polazi se od jednačine kretanja (2.21), vodeći računa da li je  $n$  parno ili neparno.

Ukoliko je  $n$  parno, tj.  $n = 2j$ ,  $j = 0, 1, 2, \dots N$ , tada su  $G_{\vec{n}, \vec{m}} = G_{\vec{n}}^a$ ,  $G_{\vec{n} + \vec{\lambda}, \vec{m}} = G_{\vec{n} + \vec{\lambda}}^b$ ,  $\Delta_{\vec{n}} = \Delta_a$  i  $X_{\vec{n}, \vec{l}} = X_{\vec{n}, \vec{n} + \vec{\lambda}} \equiv X_i$ ;  $i \in \{x, y, z\}$ . U tom slučaju jednačina kretanja je:

$$i\hbar \frac{d}{dt} G_{\vec{n}}^a(t) = i\hbar \delta_{\vec{n}\vec{m}} \delta(t) + \Delta_a G_{\vec{n}}^a + \sum_{\vec{\lambda}} X_i G_{\vec{n} + \vec{\lambda}}^b. \quad (2.22)$$

Kada je  $n$  neparno, tj.  $n = 2j + 1$ ,  $j = 0, 1, 2, \dots N$ , tada su  $G_{\vec{n}, \vec{m}} = G_{\vec{n}}^b$ ,  $G_{\vec{n} + \vec{\lambda}, \vec{m}} = G_{\vec{n} + \vec{\lambda}}^a$ ,  $\Delta_{\vec{n}} = \Delta_b$  i  $X_{\vec{n}, \vec{l}} = X_{\vec{n}, \vec{n} + \vec{\lambda}} \equiv X_i$ ;  $i \in \{x, y, z\}$ . U tom slučaju jednačina kretanja je:

$$i\hbar \frac{d}{dt} G_{\vec{n}}^b(t) = i\hbar \delta_{\vec{n}\vec{m}} \delta(t) + \Delta_b G_{\vec{n}}^b + \sum_{\vec{\lambda}} X_i G_{\vec{n} + \vec{\lambda}}^a. \quad (2.23)$$

Jednačina kretanja za Grinove funkcije (2.21) se, prema tome, deli na dve jednačine kretanja za dve Grinove funkcije, koje posle (vremenskih i prostornih) Furije-transformacija:

$$\delta(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega t}; \quad f_{\vec{a}\vec{b}}(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega f_{\vec{a}\vec{b}}(\omega) e^{-i\omega t}, \quad (2.24)$$

$$\delta_{\vec{a}\vec{b}} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{a}-\vec{b})}; \quad f_{\vec{a}\vec{b}}(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}}(\omega) e^{i\vec{k}(\vec{a}-\vec{b})}, \quad (2.25)$$

dobijaju oblik:

$$\hbar\omega G_{\vec{k}}^a(\omega) = \frac{i\hbar}{2\pi} + \Delta_a G_{\vec{k}}^a(\omega) + 2G_{\vec{k}}^b(\omega)(X_x \cos a_x k_x + X_y \cos a_y k_y + X_z \cos a_z k_z), \quad (2.26)$$

$$\hbar\omega G_{\vec{k}}^b(\omega) = \frac{i\hbar}{2\pi} + \Delta_b G_{\vec{k}}^b(\omega) + 2G_{\vec{k}}^a(\omega)(X_x \cos a_x k_x + X_y \cos a_y k_y + X_z \cos a_z k_z). \quad (2.27)$$

Pošto se radi o translaciono invarijantnoj kristalnoj strukturi za nalaženja zakona disperzije može se uzeti da su Grinove funkcije  $G_{\vec{k}}^a \equiv G_a$  i  $G_{\vec{k}}^b \equiv G_b$ . Na taj način se nalaženje zakona disperzije svodi na rešavanje sistema jednačina sa dve nepoznate Grinove funkcije  $G_a$  i  $G_b$ , čiji polovi (u  $(\omega, \vec{k})$  prostoru) definišu energije elementarnih ekscitacija u posmatranom sistemu. Kako se rešenja gornjeg sistema jednačina mogu napisati kao  $\frac{D_G^{a/b}}{D}$ , gde su  $D_G^{a/b}$  determinanta promenljive, a  $D$  determinanta sistema, uslov za nalaženje polova Grinovih funkcija se svodi na izračunavanje nula determinante posmatranog sistema jednačina:

$$D = \begin{vmatrix} \hbar\omega - \Delta_a & -2(X_x \cos a_x k_x + \\ & + X_y \cos a_y k_y + X_z \cos a_z k_z) \\ -2(X_x \cos a_x k_x + & \hbar\omega - \Delta_b \\ + X_y \cos a_y k_y + X_z \cos a_z k_z) & \end{vmatrix} = 0 \quad (2.28)$$

Razvijeni oblik determinante (uz smenu  $E = \hbar\omega$ ) je kvadratna jednačina oblika:

$$E^2 - E(\Delta_a + \Delta_b) + \Delta_a \Delta_b - 4 \left( \sum_{i=x,y,z} X_i \cos a_i k_i \right)^2 = 0 , \quad (2.29)$$

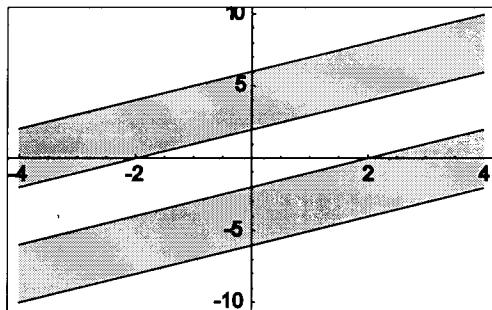
čija su rešenja:

$$E_{1,2}(\vec{k}) = \frac{\Delta_a + \Delta_b}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(\Delta_a - \Delta_b)^2 + 16 \left( \sum_{i=x,y,z} X_i \cos a_i k_i \right)^2} . \quad (2.30)$$

Uvodjenjem novog parametra  $\chi = \frac{\Delta_b}{\Delta_a}$ , zakon disperzije postaje:

$$E_{1,2}(\vec{k}) = (1 + \chi) \frac{\Delta_a}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(1 - \chi)^2 \Delta_a^2 + 16 \left( \sum_{i=x,y,z} X_i \cos a_i k_i \right)^2} . \quad (2.31)$$

Ovaj zakon disperzije prikazuje se u bezdimenzionoj formi:  $\mathcal{E}_{1,2}^*(\vec{k}) \equiv \frac{\Delta_a - E_{1,2}(\vec{k})}{|X|}$  u zavisnosti od bezdimenzione funkcije  $\mathcal{F}_{xy}^* \equiv 2 (\cos ak_x + \cos ak_y)$ . Radi malog pojednostavljenja ovde ćemo uzeti aproksimaciju:  $a_x = a_y = a_z \equiv a$ ,  $X_x = X_y = X_z \equiv -|X|$  i  $\Delta_a/|X| = 50$ . Iz izraza (2.31) se vidi da dozvoljene energetske zone (njihova širina i položaj) zavise od odnosa energija izolovanih molekula  $a$  i  $b$ , tj. od parametra  $\chi$ . Za  $\chi = 1$  ovaj zakon je prikazan na slici 2.1.



Slika 2.1: Zakon disperzije eksitona u bimolekulskom kristalu

Uočljivo je postojanje dve odvojene zone dozvoljenih (kontinualnih) energetskih nivoa.<sup>4</sup>

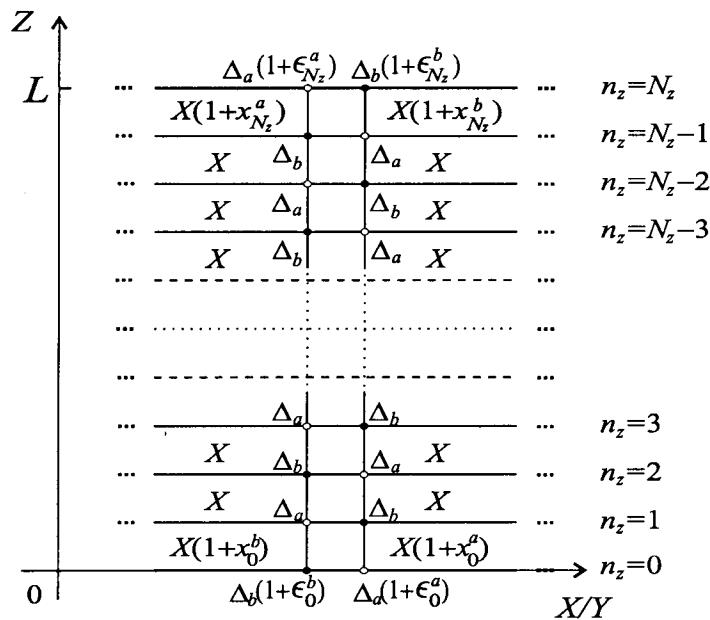
<sup>4</sup>Numerički proračuni i njihovo grafičko prikazivanje su pokazali da se ove dve zone sužavaju bilo povećanjem ili smanjenjem parametra  $\chi$  u odnosu na  $\chi = 1$ . Ovo je i očekivano, jer su molekuli proizvoljnim redosledom obeležavani sa  $a$  i  $b$ . Pored toga, povećanjem ovog parametra celi spektar se pomera ka višim, a smanjenjem – ka nižim vrednostima energija. Najmanja razlika između zona i najveća širina obeju zona je upravo za  $\chi = 1$ . Ovi rezultati biće grafički prikazani kod analiza spektara odgovarajućih kristalnih film-stuktura.

### 3 Eksitoni u bimolekulskim filmovima

U prethodnoj glavi izračunate su energije eksitona, odnosno njihov zakon disperzije u neograničenim kristalnim strukturama. Analogno primjenjujući izloženi pristup, ovde ćemo odrediti iste karakteristike ovih pobudjenja, ali u ultratankim („nano“) kristalnim film-strukturama.

#### 3.1 Model bimolekulskega filma

Za razliku od idealnih beskonačnih (prostorno-neograničenih) struktura, realni kristali ne poseduju osobinu translacione invarijantnosti do čijeg narušenja dolazi zbog postojanja izvesnih graničnih uslova. Sistemi koji imaju dve paralelne granične površi nazivaju se filmovima. Posmatra se ultratanki film složene kubne kristalne strukture, načinjen na substratu nekim tehnološkim postupkom (naparavanjem, spaterovanjem i sl.). Pojam kristalni film, koristi se u smislu narušenja kristalne strukture prostornom ograničenosti, ali bez prisustva defekata, prijema i sl. unutar posmatranog uzorka. Dimenzije filma su takve da je on u  $XY$  ravnima beskonačan, a u  $z$  pravcima ima konačnu debljinu ( $L$ ). Znači da ovaj film posede dve beskonačne granične površi paralelne  $XY$  ravnima i to za:  $z = 0$  i  $z = L$  (slika 3.1).



Slika 3.1: Model bieksitonskog filma

Na ovoj slici je šematski prikazan model kristalne film-strukture sa podrešetkom. Veličina  $\Delta_a$  predstavlja energiju eksitona lokalizovanog na čvoru vrste  $a$  — beli krugovi, dok je  $\Delta_b$  energija eksitona na čvoru vrste  $b$  — crni krugovi. Perturbacija filma uvodi se preko sledećih parametara:  $\epsilon_{0/N_z}^{a/b}$ , koji opisuju relativnu promenu energije eksitona ( $\Delta_{a/b}$ ) lokalizovanih na čvoru  $\vec{n}$  ( $n_z = 0, N_z$ ) i parametara  $x_{0/N_z}^{a/b}$ , koji opisuju perturbaciju eksitonskog transfera  $X$  izmedju susednih čvorova koji se nalaze u ganičnim slojevima.

### 3.2 Zakon disperzije eksitona

Za izračunavanje eksitonskih energija u filmu polazimo od jednačina (2.22) i (2.23) gde zbog izmenjenih uslova na granicama filma uzimamo da su perturbacione energije eksitona u čvorovima graničnih ravni  $n_z = 0$  i  $n_z = N_z$ :

$$\Delta_{\vec{n}}^{a,b} \equiv \Delta_{a,b} \left( 1 + \epsilon_0^{a,b} \delta_{n_z,0} + \epsilon_{N_z}^{b,a} \delta_{n_z,N_z} \right) \quad (3.1)$$

(veličine  $\epsilon$  su perturbacioni parametri eksitonske energije u čvorovima graničnih površi), a perturbacija energije transfera eksitona u slojevima izmedju graničnih i njima susednih ravni duž  $z$ -pravca:

$$\begin{aligned} X_{n_z,n_z+1}^{a,b} &\equiv X_z \left( 1 + x_0^{a,b} \delta_{n_z,0} + x_{N_z}^{b,a} \delta_{n_z,N_z-1} \right) ; \\ X_{n_z,n_z-1}^{a,b} &\equiv X_z \left( 1 + x_0^{a,b} \delta_{n_z,1} + x_{N_z}^{b,a} \delta_{n_z,N_z} \right) . \end{aligned} \quad (3.2)$$

Pošto su granične površi filma uzete normalno na  $z$ -pravac, indeks sloja  $n_z$  u (3.1) i (3.2) uzima vrednosti  $n_z = 0, 1, 2, \dots, N_z$ , gde je  $N_z \in [2, 20]$  kod ultratankih filmova. Indeksi  $n_x$  i  $n_y$ , koji određuju položaj molekula u svakom sloju mogu imati proizvoljne celobrojne vrednosti (praktično, od  $-\infty$ , do  $+\infty$ ).

Zbog prostorne ograničenosti filma u  $z$ -pravcu koristi se delimična prostorna Furije-transformacija (vremenska Furije-transformacija je već izvršena i odgovarajući izrazi su napisani u aproksimaciji najbližih suseda):

$$\delta_{\vec{n}\vec{m}} = \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} e^{ik_x a_x (n_x - m_x)} e^{ik_y a_y (n_y - m_y)} \delta_{n_z m_z} , \quad (3.3)$$

$$f_{\vec{n}\vec{m}}(\omega) = \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} e^{ik_x a_x (n_x - m_x)} e^{ik_y a_y (n_y - m_y)} f_{n_z m_z}(k_x, k_y, \omega) . \quad (3.4)$$

Prilikom delimične Furije-transformacije jednačine (2.22) i (2.23), radi kraćeg pisanja označimo  $G_{n_z m_z}^{a,b}(k_x, k_y, \omega) \equiv G_{n_z m_z}^{a,b}$ . Na taj način se dobijaju dva sistema jednačina za  $2(N_z + 1)$  Grinovih funkcija:

$$\begin{aligned} \hbar \omega G_{n_z; m_z}^{a,b} &= \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{n_z; m_z} + \Delta_{a,b} (1 + \epsilon_0^{a,b} \delta_{0,n_z} + \epsilon_{N_z}^{b,a} \delta_{n_z,N_z}) G_{n_z; m_z}^{a,b} + \\ &+ X_z (1 + x_0^{a,b} \delta_{1,n_z} + x_{N_z}^{b,a} \delta_{n_z,N_z}) G_{n_z-1; m_z}^{b,a} + \\ &+ X_z (1 + x_0^{a,b} \delta_{0,n_z} + x_{N_z}^{b,a} \delta_{N_z-1,n_z}) G_{n_z+1; m_z}^{b,a} + \\ &+ 2(X_x \cos a_x k_x + X_y \cos a_y k_y) G_{n_z; m_z}^{b,a} . \end{aligned} \quad (3.5)$$

Prvi set Grinovih funkcija: ( $G_0^a, G_1^b, G_2^a, \dots, G_{N_z-1}^a, G_{N_z}^b$ ) odgovara nizu atoma (duž  $z$ -pravca) kada on počinje sa atomom vrste  $a$  u prvom  $XY$ -sloju ( $n_z = 0$ ), dok u drugom setu: ( $G_0^b, G_1^a, G_2^b, \dots, G_{N_z-1}^b, G_{N_z}^a$ ) prvi sloj počinje atomom vrste  $b$ . Pored toga važi i  $G_{n_z}^{a/b} = 0$  za  $n_z > N_z$  i  $n_z < 0$ .

Prvi set jednačina ima sledeći oblik:

- za  $n_z = 0$ :

$$\begin{aligned} \hbar \omega G_{0; m_z}^a &= \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{0; m_z} + \Delta_a (1 + \epsilon_0^a) G_{0; m_z}^a + X_z (1 + x_0^a) G_{1; m_z}^b + \\ &+ 2(X_x \cos a_x k_x + X_y \cos a_y k_y) G_{0; m_z}^b , \end{aligned}$$

- za  $n_z = 1$ :

$$\begin{aligned}\hbar\omega G_{1;m_z}^b &= \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{1;m_z} + \Delta_b G_{1;m_z}^b + X_z(1+x_0^a)G_{0;m_z}^a + X_z G_{2;m_z}^a + \\ &+ 2(X_x \cos a_x k_x + X_y \cos a_y k_y)G_{1;m_z}^a,\end{aligned}$$

- za  $n_z = 2j$ :

$$\begin{aligned}\hbar\omega G_{2j;m_z}^a &= \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{2j;m_z} + \Delta_a G_{2j;m_z}^a + X_z(G_{2j-1;m_z}^b + G_{2j+1;m_z}^b) + \\ &+ 2(X_x \cos a_x k_x + X_y \cos a_y k_y)G_{2j;m_z}^b,\end{aligned}\quad (3.6)$$

- za  $n_z = 2j + 1$ :

$$\begin{aligned}\hbar\omega G_{2j+1;m_z}^b &= \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{2j+1;m_z} + \Delta_b G_{2j+1;m_z}^b + X_z(G_{2j;m_z}^a + G_{2j+2;m_z}^a) + \\ &+ 2(X_x \cos a_x k_x + X_y \cos a_y k_y)G_{2j+1;m_z}^a,\end{aligned}$$

- za  $n_z = N_z - 1$ :

$$\begin{aligned}\hbar\omega G_{N_z-1;m_z}^a &= \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{N_z-1;m_z} + \Delta_a G_{N_z-1;m_z}^a + X_z G_{N_z-2;m_z}^b + X_z(1+x_{N_z}^b)G_{N_z;m_z}^b + \\ &+ 2(X_x \cos a_x k_x + X_y \cos a_y k_y)G_{N_z-1;m_z}^b,\end{aligned}$$

- za  $n_z = N_z$ :

$$\begin{aligned}\hbar\omega G_{N_z;m_z}^b &= \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{N_z;m_z} + \Delta_b(1+\epsilon_{N_z}^b)G_{N_z;m_z}^b + X_z(1+x_{N_z}^b)G_{N_z-1;m_z}^a + \\ &+ 2(X_x \cos a_x k_x + X_y \cos a_y k_y)G_{N_z;m_z}^a,\end{aligned}$$

odnosno predstavljen u opštem obliku:

$$\begin{aligned}\hbar\omega G_{2j;m_z}^a &= \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{2j;m_z} + \Delta_a(1+\epsilon_0^a \delta_{0,n_z})G_{2j;m_z}^a + X_z G_{2j-1;m_z}^b + \\ &+ X_z(1+x_0^a \delta_{0,n_z} + x_{N_z}^b \delta_{N_z-1,n_z})G_{2j+1;m_z}^b + \\ &+ 2(X_x \cos a_x k_x + X_y \cos a_y k_y)G_{2j;m_z}^b,\end{aligned}\quad (3.7)$$

$$\begin{aligned}\hbar\omega G_{2j+1;m_z}^b &= \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{2j+1;m_z} + \Delta_b(1+\epsilon_{N_z}^b \delta_{N_z,n_z})G_{2j+1;m_z}^b + \\ &+ X_z(1+x_0^a \delta_{1,n_z} + x_{N_z}^b \delta_{N_z,n_z})G_{2j;m_z}^a + X_z G_{2j+2;m_z}^a + \\ &+ 2(X_x \cos a_x k_x + X_y \cos a_y k_y)G_{2j+1;m_z}^a;\end{aligned}$$

$$j = 0, 1, 2, \dots, N_z/2.$$

Prvi i drugi set jednačina su medjusobno ekvivalentni ukoliko se uvede smena  $a \leftrightarrow b$ . Na taj način opšti oblik drugog seta je:

$$\begin{aligned}
 \hbar\omega G_{2j;m_z}^b &= \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{2j;m_z} + \Delta_b (1 + \epsilon_0^b \delta_{0,n_z}) G_{2j;m_z}^b + \\
 &+ X_z G_{2j-1;m_z}^a + X_z (1 + x_0^b \delta_{0,n_z} + x_{N_z}^a \delta_{N_z-1,n_z}) G_{2j+1;m_z}^a + \\
 &+ 2G_{2j;m_z}^a (X_x \cos a_x k_x + X_y \cos a_y k_y), 
 \end{aligned} \tag{3.8}$$

$$\begin{aligned}
 \hbar\omega G_{2j+1;m_z}^a &= \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{2j+1;m_z} + \Delta_a (1 + \epsilon_{N_z}^a \delta_{N_z,n_z}) G_{2j+1;m_z}^a + \\
 &+ X_z (1 + x_0^b \delta_{1,n_z} + x_{N_z}^a \delta_{N_z,n_z}) G_{2j;m_z}^b + X_z G_{2j+2;m_z}^b + \\
 &+ 2G_{2j+1;m_z}^b (X_x \cos a_x k_x + X_y \cos a_y k_y).
 \end{aligned}$$

Zbog konciznijeg zapisa uvode se sledeće oznake:

$$\begin{aligned}
 \varrho &= \frac{\hbar\omega}{X_z} - \frac{\Delta_a}{X_z}; & R &= 2 \frac{X_x \cos a_x k_x + X_y \cos a_y k_y}{X_z}; \\
 \mathcal{K}_{n_z;m_z}^{a/b} &= \frac{i\hbar}{2\pi} \frac{\delta_{n_z;m_z}}{X_z}; & \chi &= \frac{\Delta_b}{\Delta_a},
 \end{aligned} \tag{3.9}$$

tako da sada prvi set jednačina dobija sledeću formu (uopšteni oblik):

$$\begin{aligned}
 &-G_{2j-1;m_z}^b + \left( \varrho - \frac{\Delta_a}{X_z} \epsilon_0^a \delta_{0,n_z} \right) G_{2j;m_z}^a - \\
 &- (1 + x_0^a \delta_{0,n_z} + x_{N_z}^b \delta_{N_z-1,n_z}) G_{2j+1;m_z}^b - RG_{2j;m_z}^b = \mathcal{K}_{2j;m_z}^a, \\
 &- (1 + x_0^a \delta_{1,n_z} + x_{N_z}^b \delta_{N_z,n_z}) G_{2j;m_z}^a + \left[ \varrho + \frac{\Delta_a}{X_z} (1 - \chi - \chi \epsilon_{N_z}^b \delta_{N_z,n_z}) \right] G_{2j+1;m_z}^b - \\
 &-G_{2j+2;m_z}^a - RG_{2j+1;m_z}^a = \mathcal{K}_{2j+1;m_z}^b,
 \end{aligned} \tag{3.10}$$

a drugi set je:

$$\begin{aligned}
 &-G_{2j-1;m_z}^a + \left[ \varrho + \frac{\Delta_a}{X_z} (1 - \chi - \chi \epsilon_0^b \delta_{0,n_z}) \right] G_{2j;m_z}^b - \\
 &- (1 + x_0^b \delta_{0,n_z} + x_{N_z}^a \delta_{N_z-1,n_z}) G_{2j+1;m_z}^a - RG_{2j;m_z}^a = \mathcal{K}_{2j;m_z}^b, \\
 &- (1 + x_0^b \delta_{1,n_z} + x_{N_z}^a \delta_{N_z,n_z}) G_{2j;m_z}^b + \left( \varrho - \frac{\Delta_a}{X_z} \epsilon_{N_z}^a \delta_{N_z,n_z}^a \right) G_{2j+1;m_z}^a - \\
 &-G_{2j+2;m_z}^b - RG_{2j+1;m_z}^b = \mathcal{K}_{2j+1;m_z}^a.
 \end{aligned} \tag{3.11}$$

U cilju rešavanja osnovnog zadatka ovog rada – određivanje energija eksitona, potrebno je naći polove Grinovih funkcija, čiji realni delovi predstavljaju energije elementarnih ekscitacija sistema. Nalaženje eksitonskih energija se svodi na uslov  $D = 0$ . Determinanta ( $D$ ) sistema jednačina (3.9) i (3.10) može se izraziti u konciznoj formi:

$$D = \begin{vmatrix} \hat{\mathcal{D}}^1_{N_z+1} & \hat{\mathcal{R}}_{N_z+1} \\ \hat{\mathcal{R}}_{N_z+1} & \hat{\mathcal{D}}^2_{N_z+1} \end{vmatrix}_{2(N_z+1)} \quad (3.12)$$

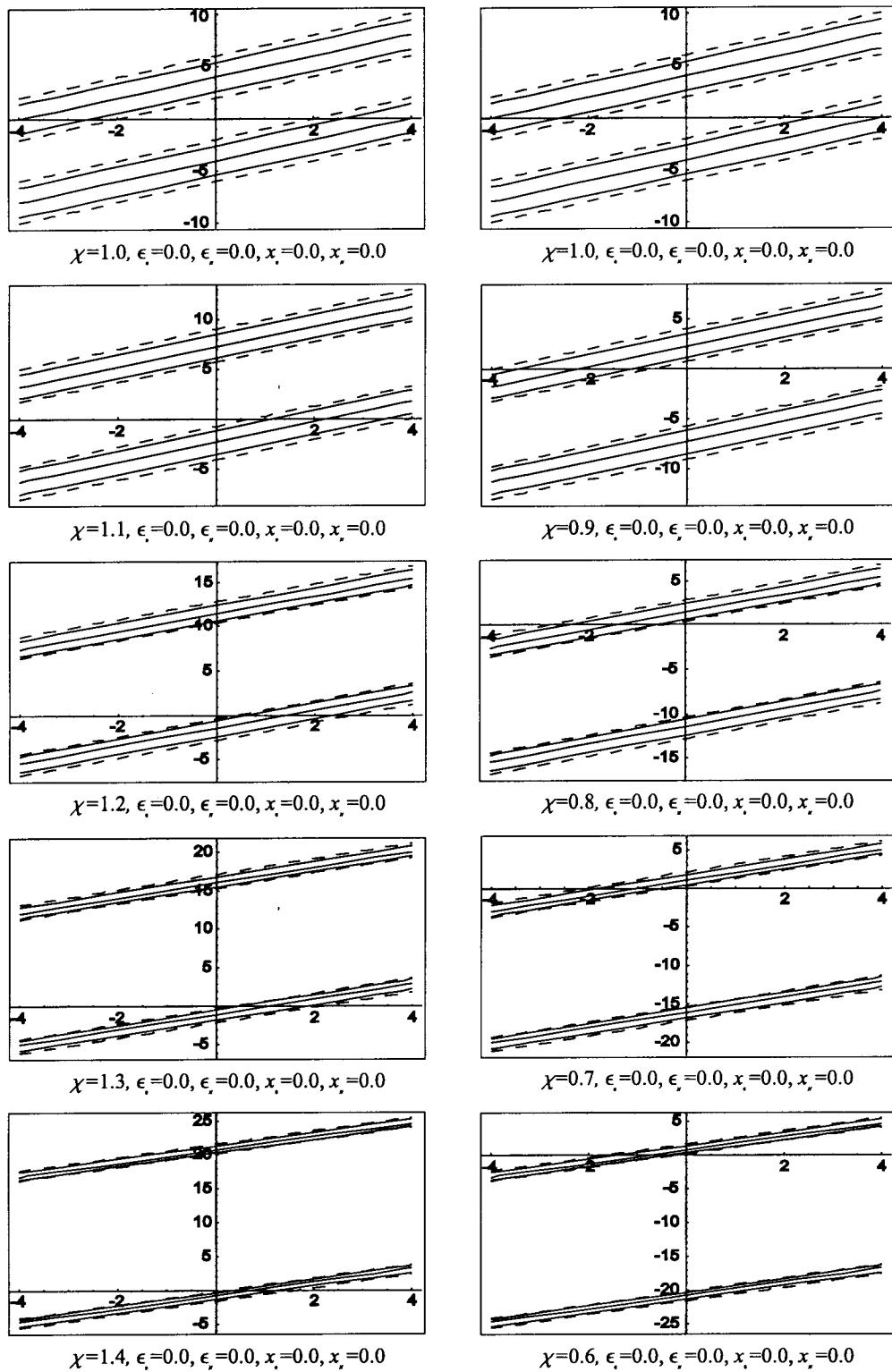
pri čemu je:  $\hat{\mathcal{R}}_{N_z+1} = -R \cdot \hat{I}_{N_z+1}$ , dok  $\hat{I}_{N_z+1}$  predstavlja jediničnu matricu, a:

$$\hat{\mathcal{D}}^1_{N_z+1} = \begin{vmatrix} \varrho - \frac{\Delta_a}{X_z} \epsilon_0^a & -(1+x_0^a) & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ -(1+x_0^a) & \varrho + \frac{\Delta_a}{X_z}(1-\chi) & -1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & \varrho & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \varrho + \frac{\Delta_a}{X_z}(1-\chi) & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -1 & \varrho & -(1+x_{N_z}^b) \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & -(1+x_{N_z}^b) & \varrho + \frac{\Delta_a}{X_z}(1-\chi - \chi \epsilon_{N_z}^b) \end{vmatrix}_{N_z+1}$$
  

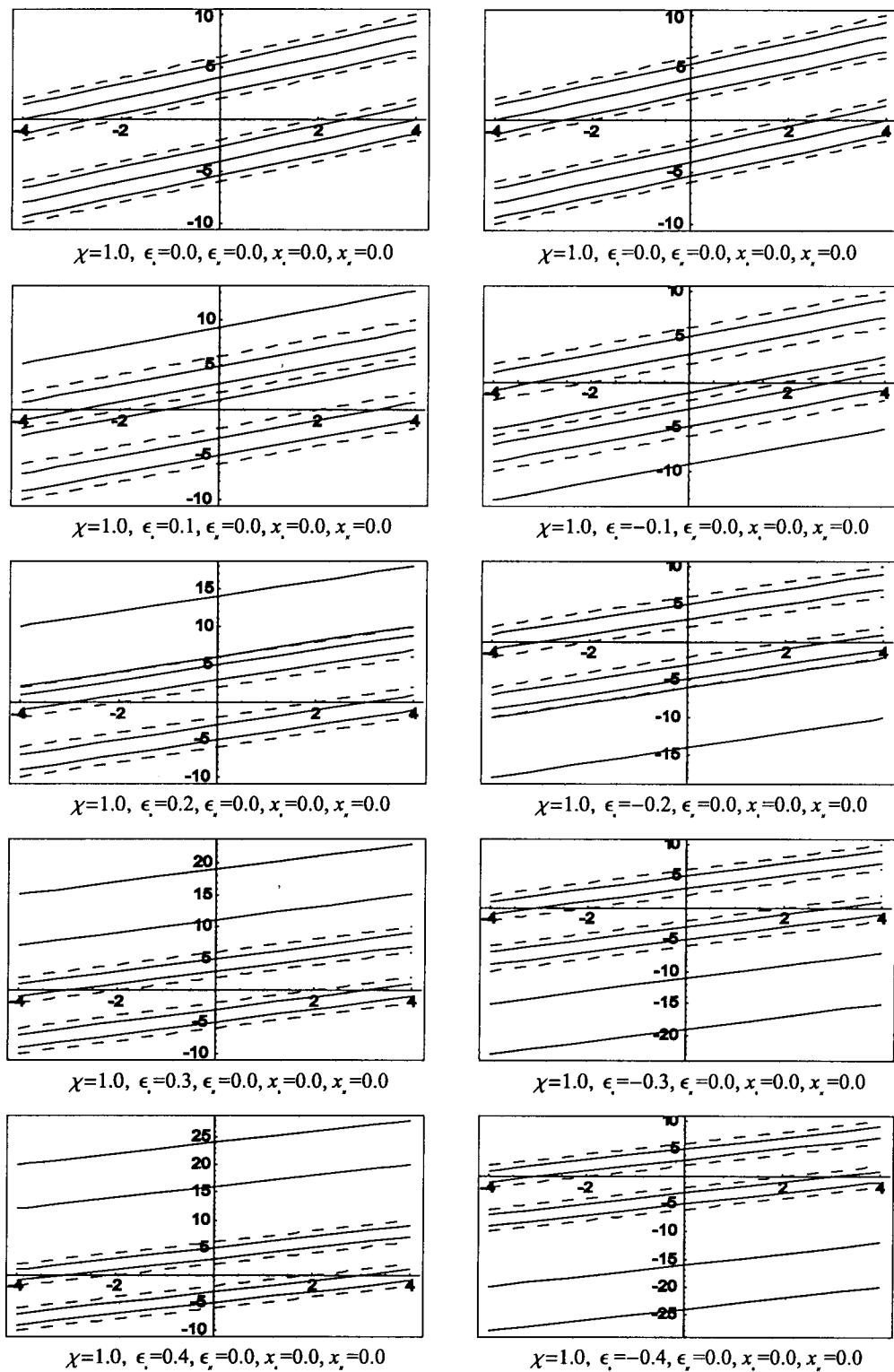
$$\hat{\mathcal{D}}^2_{N_z+1} = \begin{vmatrix} \varrho + \frac{\Delta_a}{X_z}(1-\chi - \chi \epsilon_0^b) & -(1+x_0^b) & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ -(1+x_0^b) & \varrho & -1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & \varrho + \frac{\Delta_a}{X_z}(1-\chi) & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \varrho & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -1 & \varrho + \frac{\Delta_a}{X_z}(1-\chi) & -(1+x_{N_z}^a) \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & -(1+x_{N_z}^a) & \varrho - \frac{\Delta_a}{X_z} \epsilon_{N_z}^a \end{vmatrix}_{N_z+1}$$

Karakteristični grafici za „jako” perturbovan film uradjeni su programskim paketom it Mathematica 4.0 i prikazani na slikama 3.2 do 3.4. Radi malog pojednostavljenja, kao i u balkovskom slučaju, i ovde ćemo uzeti aproksimaciju:  $a_x = a_y = a_z \equiv a$ ,  $X_x = X_y = X_z \equiv -|X|$  i  $\Delta_a/|X| = 50$ . Na osnovu toga, dobijali smo zavisnost relativnih (redukovanih) energija (na ordinatama)  $\mathcal{E}_\nu^* = \frac{\Delta_a - \hbar\omega}{|X|} \equiv \varrho_\nu$ ;  $\nu = 1, 2, 3, \dots, N+1$ ; u zavisnosti od bezdimenzione funkcije  $\mathcal{F}_{xy}^* \equiv 2(\cos ak_x + \cos ak_y)$  (na apscisama grafika).

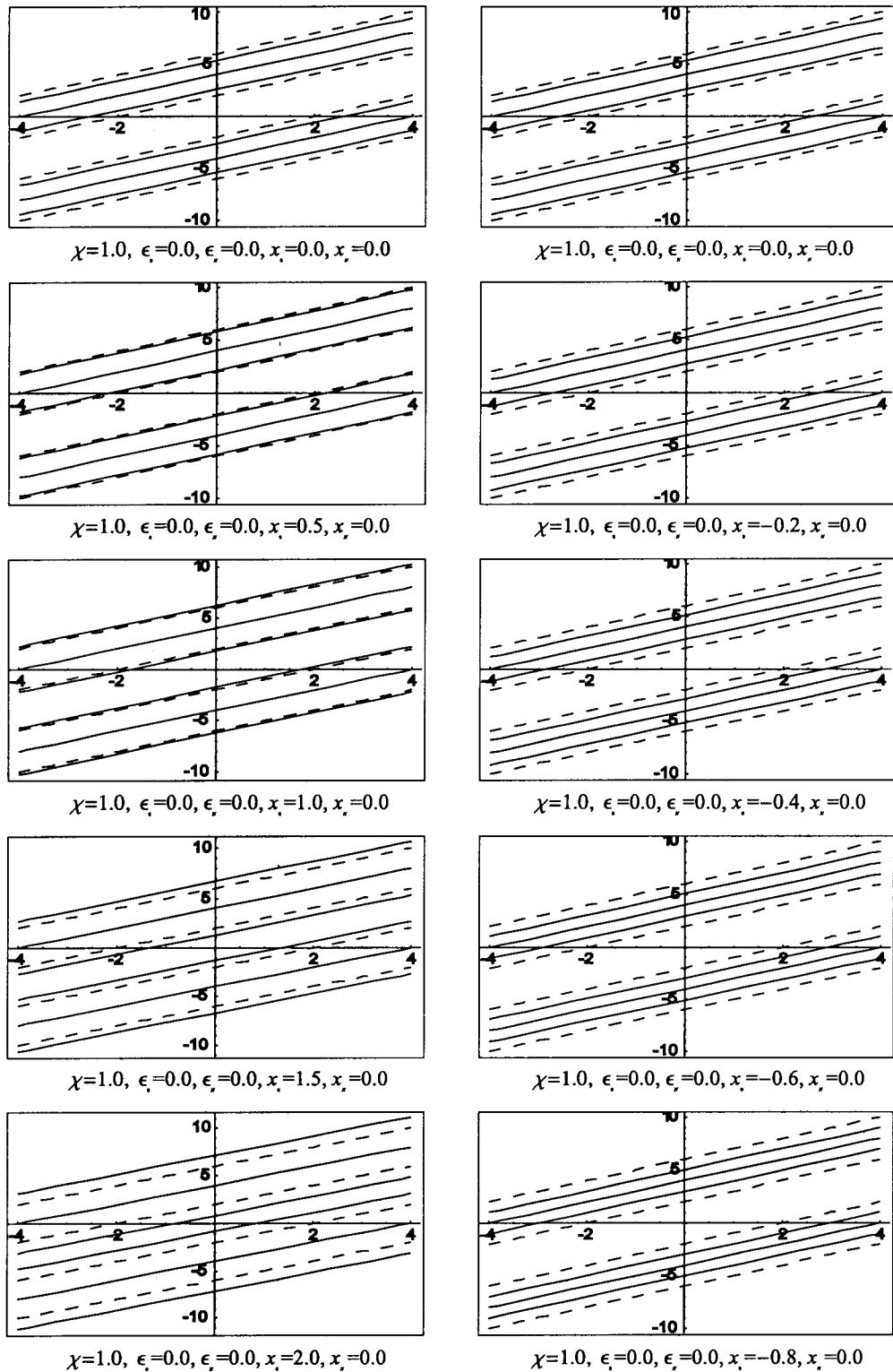
Isprekidanim linijama označene su balkovske granice, a punim – mogući energetski nivoi eksitona u perturbovanom filmu! Uočljivo je da se može javiti jedno ili dva lokalizovana stanja u svakoj energetskoj zoni. To su stanja koja „izlaze” iz balkovskih granica. Gornji grafici na svakoj slici odgovaraju idealnom filmu: tamo su perturbacioni parametri jednaki nuli.



Slika 3.2: Zakon disperzije eksitona u perturbovanom filmu



Slika 3.3: Zakon disperzije eksitona u perturbovanom filmu



Slika 3.4: Zakon disperzije eksitona u perturbovanom filmu

Na slici 3.2 prikazane su redukovane energije eksitona šestoslojnog bimolekulskog filma (punim linijama) u zavisnosti od dvodimenzionale funkcije pri čemu se menja odnos energija na čvorovima  $a$  i  $b$ , tj. parametar  $\chi = \Delta_a/\Delta_b$  u intervalu [0.7, 1.4], dok su ostali perturbacioni parametri zadržani na nultim vrednostima (da bi se video samo uticaj  $\chi$ ). Povećanjem (odnosno smanjenjem) parametra  $\chi$  (u odnosu na  $\chi = 1$ ) oba spektara se pomeraju ka višim (odnosno nižim) vrednostima energija, ali ne dolazi do pojave lokalizovanih stanja, jer se istovremeno pomeraju i granice balkovskih energetskih zona (isprekidane linije) i ne dolazi do izlaska energetskih nivoa van balkovskih granica. U svim slučajevima promene parametra  $\chi$  dolazi do sužavanja energetskih spektara u obe zone.

Na slici 3.3 prikazane su redukovane energije eksitona šestoslojnog bimolekulskog filma (punim linijama) u zavisnosti od dvodimenzionale funkcije pri čemu se menja energetska perturbacija  $\epsilon$  energije molekula na čvoru  $\Delta$  kada se molekul nalazi na graničnim ravnima ( $n_z = 0$  i  $n_z = N$ ), tj.  $\Delta_{0,N} = (1 + \epsilon_{0,N})\Delta$ . Posto je promena ovih spektara izmenom parametra  $\epsilon_0$  ista kao i izmenom  $\epsilon_N$ , ovde je data samo zavisnost od  $\epsilon_0$ . Ostali granični perturbacioni parametri su bili stalno nepromenljivi (nulte vrednosti!) da bi se utvrdio uticaj samo posmatranog parametra. Analizom ovih grafika može se zaključiti da se povećanjem (odnosno, smanjenjem) parametra  $\epsilon$ , spektar mogućih eksitonskih energija širi i to pomeranjem ka višim (tj. ka nižim) energijama. Ovo pomeranje se dešava tako da se samo po jedan energetski nivo „izbacuje“ van svake balkovske zone (označene isprekidanim linijama). Ovaj nivo je udaljeniji od balkovske zone što je perturbacija veća, odnosno, što je parametar  $\epsilon$  po apsolutnoj vrednosti veći.

Na slici 3.4 prikazane su redukovane energije eksitona šestoslojnog bimolekulskog filma (punim linijama) u zavisnosti od dvodimenzionale funkcije pri čemu se menja energetska perturbacija  $x$  energije transfera eksitona (medjumolekulska interakcija) između graničnih i njima susednih ravnih ( $n_z = 0$  i  $n_z = 1$ , tj.  $n_z = N$  i  $n_z = N - 1$ ):  $X_{0,N} = (1 + x_{0,N})X$ . Posto je promena ovih spektara izmenom parametra  $x_0$  ista kao i izmenom  $x_N$  ovde je data samo zavisnost od  $x_0$ . Ostali granični perturbacioni parametri su bili stalno nepromenljivi (nulte vrednosti!) da bi se utvrdio uticaj samo posmatranog parametra. Analizom ovih grafika može se zaključiti da se povećanjem parametra  $x$ , spektar mogućih eksitonskih energija simetrično širi i to jednakim pomeranjem ka višim i nižim energijama. Ovo širenje se dešava tako da se istovremeno po dva energetska nivoa „izbacuju“ van svake balkovske zone (označene isprekidanim linijama). Ovi nivoi – lokalizovana stanja su udaljenija od balkovske zone što je perturbacija veća, odnosno, što je parametar  $x$  veći. I ovde se vidi je da se ova stanja javljaju i da su ona dislocirana iz zone dozvoljenih energija eksitona u neograničenim strukturama, ali se ne može tvrditi kolika je verovatnoća njihovog nalaženja niti gde se ona mogu pojaviti. Smanjenjem parametra  $x$  dolazi do neznatnog sužavanja unutrašnjih energetskih nivoa, dok širina celog spektra, tj. zona, ostaje praktično nepromenjena i u ovom slučaju nema lokalizovanih stanja.

Izdvojena vanbalkovska stanja su poznata pod nazivom lokalizovana stanja. Ono što se ovde vidi je da se ova stanja javljaju i da su ona dislocirana iz zone dozvoljenih energija eksitona u neograničenim strukturama, ali se ne može tvrditi kolika je verovatnoća njihovog nalaženja niti gde se ona mogu pojaviti.

Iz svih prikazanih grafika je uočljiva diskretnost energetskih stanja eksitona u filmovima. Za razliku od kontinualnih balkovskih zona, ovde se može javiti onoliko energetskih nivoa koliko ima dvodimenzionih stanja, a mi smo razmatrali slučaj šestoslojnog filma, dakle sa šest mogućih energetskih nivoa.

## 4 Zaključak

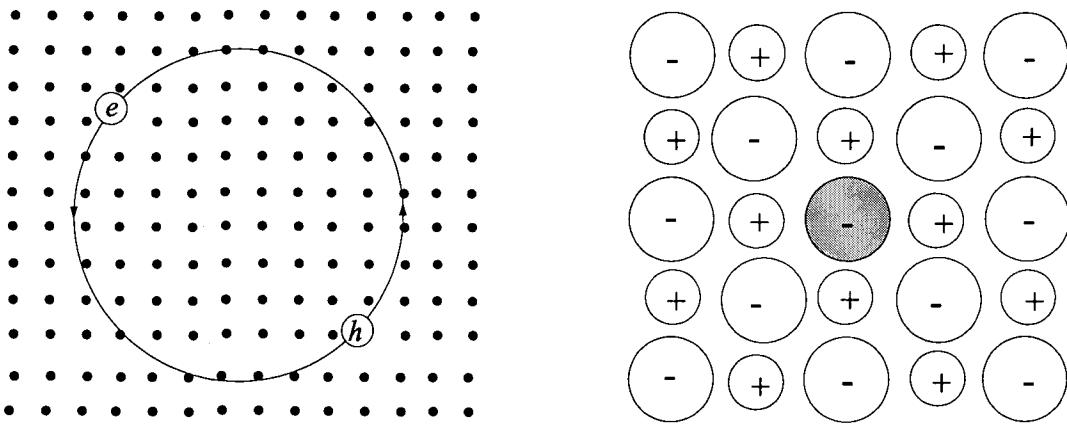
U radu su istraženi i analizirani energetski spektri (moguća energetska stanja) eksitona u dielektričnim, kristalnim, idealnim beskonačnim i film-strukturama, sa složenom kubnom rešetkom, na osnovu čega se došlo do sledećih važnijih rezultata.

1. Ove analize su pokazale bitne razlike u zakonu disperzije eksitona u pomenuta dva sistema, kao isključive posledice postojanja granica film-struktura i promenjenih vrednosti relevantnih karakteristika kristala na, odnosno u graničnim slojevima.
2. Postojanje graničnih uslova ima za posledicu promenu širina energetskih zona eksitona. U odnosu na zone dozvoljenih energija idealnih struktura sa praktično kontinualnim rasporedom, zone eksitonskih dozvoljenih energija u filmu su izrazito diskretne sa konačnim brojem mogućih energetskih nivoa koji je proporcionalan broju atomskih ravni duž  $z$ -pravca.
3. Povećanjem eksitonske energije na graničnim površima filma (povećanjem parametra  $\epsilon$ ) dolazi do širenja i pomeranja energetskih spektara ka višim energijama, dok se povećanjem vrednosti energije transfera eksitona izmedju graničnih i njima susednih slojeva filma (povećanjem parametra  $x$ ) spektar širi simetrično u odnosu na balkovske granice.
4. Za neke vrednosti pomenutih parametara energetske zone eksitona u filmovima izlaze van odgovarajućih zona eksitonskih energija neograničenog kristala. U tom slučaju pojavljuju se lokalizovana eksitonska stanja. Uočljiva je i izražena zavisnost veličine energije lokalizovanih stanja eksitona od vrednosti graničnih energetskih parametara.

## 5 Dodatak: Eksitoni u molekulskim kristalima

### 5.1 Eksitoni u kristalima

Apsorpcioni i refleksioni spektri često pokazuju strukturu za fotonsku energiju ispod energetskog gepa, gde bi inače očekivali da kristal bude transparentan. Ovakva struktura prouzrokovana je apsorpcijom fotona i kreacijom para elektron–šupljina. Elektron i šupljina su vezani privlačnom Kulonovom interakcijom slično kao što je elektron vezan sa protonom u formu neutralnog atoma vodonika. Ovakav par elektron–šupljina se naziva eksiton. Na slici 5.1a prikazan je eksiton Vanije-Mota koji je slabo vezan, sa srednjom udaljenošću elektron–šupljina velikom u poređenju sa konstantom rešetke. Na slici 5.1b je šematski predstavljen jako vezan ili Frenkelov eksiton. Jedan idealan Frenkelov eksiton će prolaziti kroz ceo kristal kao talas, ali elektron će uvek biti u neposrednoj blizini šupljine.



Slika 5.1: a) Eksiton Vanije-Mota

b) Frenkelov eksiton

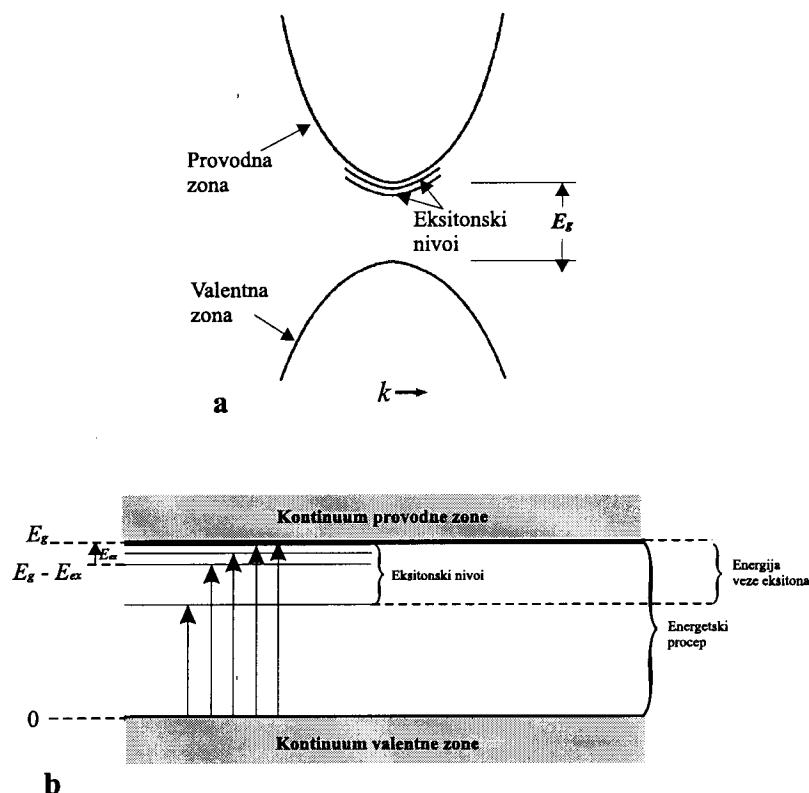
Eksiton se može kretati kroz kristal i prenosi energiju, ali eksiton ne prenosi nanelektrisanje, jer je električno neutralan. On je sličan pozitronijumu koji je sastavljen od elektrona i pozitrona. Eksiton može biti formiran u svakom izolatoru. Svi eksitoni su nestabilni i imaju relativno malo vreme života (singletni  $10^{-8}$ s, a tripletni i do  $10^{-3}$ s). Eksitoni mogu formirati i komplekse, kao što su bieksitoni - kreirani od dva eksitona.

Videli smo da se slobodni elektron i slobodna šupljina kreiraju kad god je energija fotona veća od energije gepa. Prag za ovaj proces je  $\hbar\omega > E_g$  u direktnom procesu. Međutim, sama energija veze eksitona još smanjuje taj prag. Energije veze eksitona se kreću od reda veličine 1 meV (Vanije-Motov) do 1 eV (Frenkelov).

Prelazi kojima se formiraju eksitoni ispod energetskog gepa su prikazani na slikama 5.2a i 5.2b. Slika 5.2a prikazuje eksitonske nivoje u odnosu na granicu provodne zone. Eksiton može imati translacionu kinetičku energiju, ali ako je ova kinetička energija veća od energije veze eksitona, tada je eksiton metastabilan u odnosu na njegovo raspadanje na slobodnu šupljinu i slobodni elektron. Svi eksitoni su potencijalno nestabilni u odnosu na emisivnu rekombinaciju, kod koje elektron „upada” u stanje šupljine u valentnoj zoni, što je popraćeno emisijom fotona ili fonona.

Slika 5.2b prikazuje energetske nivoje eksitona čiji je centar masa u mirovanju. Optički prelazi sa vrha valentne zone su prikazani strelicama, najduža odgovara ionizaciji eksitona

pa prema tome i energetskom procepu izmedju granica provodne i valentne zone. Postoji kontinualan skup nivoa, pridruženih svakom od prikazanih eksitonskih nivoa, pošto centar masa eksitona može posedovati translacionu kinetičku energiju (svaki eksitonski nivo obrazuje jednu eksitonsku zonu). Kod direktnih optičkih prelaza ukupna translaciona energija se ne menja osetnije, što znači da mogu postojati oštре eksitonske linije. Nula na skali energije je uzeta od vrha valentne zone.



Slika 5.2: Energetski nivoi eksitona

Energija veze eksitona može se meriti na tri načina.

- U optičkom prelazu iz valentne zone: iz razlike izmedju energije potrebne za kreaciju eksitona i energije kreacije slobodnog elektrona i slobodne šupljine (slika 5.2).
- Iz luminescencije prilikom rekombinacije, uporedjivanjem energije potrebne za rekombinaciju para elektron–šupljina i energije eksitacione rekombinacije.
- Fotoionizacijom eksitona kada nastaju slobodni nosioci. Ovaj eksperiment zahteva visoku koncentraciju eksitona.

Ovde postoje dve granične aproksimacije, jedna po Frenkelu, gde su eksitonii malog radiusa i čvrsto vezani, a druga po Vanije-Motu, gde su eksitonii slabo vezani i gde je udaljenost izmedju elektrona i šupljine velika u poređenju sa konstantom rešetke. U realnosti se javljaju mešana eksitonska stanja, ali u zavisnosti da li će sistem biti Frenkelov (kristal molekulskog tipa) ili Vanije-Motov (kristal poluprovodničkog tipa) odlučuje veličina koncentracije odgovarajućeg stanja.

## 5.2 Frenkelovi eksitonii

U čvrsto vezanom eksitonu (slika 5.1b) pobudjenje je lokalizovano u blizini atoma. Šupljina je obično na istom atomu gde je i elektron iako par može biti u kristalu. Frenkelov eksiton je u biti pobudjeno stanje atoma, ali pobudjenje može da se prenosi od jednog atoma do drugog.

Kristali inertnih gasova imaju eksitone koji u osnovnom stanju donekle korespondiraju Frenkelovom modelu. Tako atomski kripton ima svoj najniži atomske prelaze na 9.99 eV, a u kristalnom stanju odgovarajući prelaz je približno jednak i iznosi 10.17 eV. Energetski gap u kristalu iznosi 11.7 eV, tako da je energija osnovnog stanja eksitona 11.7 eV – 10.17 eV = 1.5 eV i ona se raspodeljuje na slobodan elektron i slobodnu šupljinu odvojeno, kao i na ostatak kristala.

Stanja Frenkelovih eksitonih imaju oblik progresivnog talasa, kao i sva ostala pobudjenja u periodičnoj strukturi. Posmatrajmo kristal od  $N$  atoma u linijskom nizu ili povezanih u prsten. Ako je  $u_j$  osnovno stanje atoma  $j$ , onda je osnovno stanje kristala dato kao:

$$\psi_g = u_1 u_2 \cdots u_{N-1} u_N , \quad (5.1)$$

ukoliko su interakcije izmedju atoma zanemarene. Ukoliko je jedan atom  $j$  u pobudjenom stanju  $v_j$ , sistem se opisuje kao:

$$\phi_j = u_1 u_2 \cdots u_{j-1} v_j u_{j+1} \cdots u_N . \quad (5.2)$$

Ova funkcija ima istu energiju kao i funkcija  $\phi_l$  koja opisuje bilo koji drugi pobudjeni atom  $l$ . Međutim, funkcije  $\phi$  koje opisuju jedan pobudjeni atom i  $N - 1$  atoma u njegovom okruženju, koji su osnovnom stanju, nisu stacionarna kvantna stanja. Ako postoji bilo kakva interakcija izmedju pobudjenog atoma i susednih atoma u osnovnom stanju, energija pobudjenja će se prenositi od atoma do atoma. Kao što će biti pokazano, svojstvena stanja će tada imati talasnu formu.

Kada hamiltonijan sistema deluje na funkciju sa  $j$ -tim pobudjenim atomom, dobija se:

$$H\phi_j = \epsilon\phi_j + T(\phi_{j-1} + \phi_{j+1}) , \quad (5.3)$$

gde je  $\epsilon$  - ekscitaciona energija slobodnog atoma,  $T$  - interakcija koja meri ideo transfera pobudjenja od  $j$ -toga atoma do njegovih najbližih suseda  $j - 1$  i  $j + 1$ . Rešenja prethodne jednačine su talasi Blohovog oblika:

$$\psi_k = \sum_j e^{ijk} \phi_j . \quad (5.4)$$

Pustimo da operator  $H$  deluje na  $\psi_k$ :

$$H\psi_k = \sum_j e^{ijka} H\phi_j = \sum_j e^{ijka} [\epsilon\phi_j + T(\phi_{j-1} + \phi_{j+1})] . \quad (5.5)$$

Sredjivanjem desne strane sledi:

$$H\psi_k = \sum_j e^{ijka} [\epsilon + T(e^{ika} + e^{-ika})] \phi_j = (\epsilon + 2T \cos ka) \psi_k , \quad (5.6)$$

tako da se dobijaju svojstvena energetska stanja kao:

$$E_k = \epsilon + 2T \cos ka . \quad (5.7)$$

Primenom periodičnih graničnih uslova određuju se dozvoljene vrednosti talasnog vektora  $k$ :

$$k = \frac{2\pi s}{Na} ; \quad s = -\frac{1}{2}N, -\frac{1}{2}N+1, \dots -\frac{1}{2}N-1 . \quad (5.8)$$

U molekulskim kristalima kovalentna veza unutar molekula je mnogo jača od Van der Walsovih veza između molekula, tako da se javljaju Frenkelovi eksitoni. Elektronska pobudjenja na individualnom molekulu se pojavljuju u kristalu kao eksitoni, često sa malim pomerajem u frekvenciji. Na niskim temperaturama linije u kristalu su relativno oštре, iako može biti više linijska struktura u kristalu nego u molekulu, zbog Davidovog cepanja. Davidov je pokazao da ako postoji  $\sigma$  molekula sa nedegenerisanim nivoima u elementarnoj ćeliji, svaka zona se cepta na  $\sigma$  zona. Drugo cepanje je Beteovo – ako je nivo na koji se molekul pobudjuje  $g$  puta degenerisan, onda se umesto jedne dobija  $g$  eksitonskih zona.

## 6 Literatura

1. V.M.Agranovich:  
TEORIYA EKSITONOV,  
*Hayka*, Moskva 1968.
2. L.L.Chang and L.Esaki,  
*Phys. Today Oct.* 36 (1992).
3. M.G.Cottam and D.R.Tilley:  
INTRODUCTION TO SURFACE AND  
SUPERLATTICE EXCITATIONS,  
*Univ.Press*, Cambridge 1989.
4. D.Raković:  
FIZIČKE OSNOVE I KARAKTERISTIKE  
ELEKTROTEHNIČKIH MATERIJALA,  
*Elektrotehnički fakultet*, Beograd 1995.
5. G.Rickayzen:  
GREEN'S FUNCTIONS AND CONDENSED MATTER,  
*Academic Press*, London 1980.
6. B.S.Tošić:  
STATISTIČKA FIZIKA,  
*PMF IF*, Novi Sad 1978.
7. G.Mahan:  
MANY PARTICLE PHYSICS,  
*Plenum Press*, New York 1990.
8. V.M.Agranovich and V.L.Ginzburg:  
CRYSTALOPTIC WITH SPACE DISPERSION  
AND THEORY OF EXCITONS,  
*Nauka*, Moskwa 1979.
9. I.D.Vragović, S.M.Vučenović, J.P.Šetrajčić,  
S.M.Stojković, D.Lj.Mirjanić i D.Raković:  
OPTIČKE KARAKTERISTIKE DIELEKTRIČNIH FILMOVA,  
*Zbornik radova 2. Simpozijum industrijske elektronoike*, 33-37 (1999).
10. C.Kittel:  
QUANTUM THEORY OF SOLIDS,  
*Wiley*, New York 1963.

## Kratka biografija autora



Rodjen 15.10.1976. u Novom Sadu. Završio osnovnu školu "Dositej Obradović" u Novom Sadu, a zatim srednju elektro-tehničku školu "Mihajlo Pupin", takođe u Novom Sadu. Prirodno-matematički fakultet, odsek za fiziku, smer diplomirani fizičar upisao 1996.

Novi Sad, 27.07.2003.

Laza Rutonjski

Rutonjski Laza

**UNIVERZITET U NOVOM SADU**  
**PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET**  
**KLJUČNA DOKUMENTACIJSKA INFORMACIJA**

- Redni broj:  
RBR
- Identifikacioni broj:  
IBR
- Tip dokumentacije:  
*Monografska dokumentacija*  
TD
- Tip zapisa:  
*Tekstualni štampani materijal*  
TZ
- Vrsta rada:  
*Diplomski rad*  
VR
- Autor:  
*Laza Rutonjski, br.dos. 358/96*  
AU
- Mentor:  
*Dr Jovan Šetrajčić,  
redovni profesor, PMF, Novi Sad*  
MN
- Naslov rada:  
*Eksitonska stanja u  
bimolekulskim kristalnim filmovima*  
NR
- Jezik publikacije:  
*Srpski (latinica)*  
JP
- Jezik izvoda:  
*Srpski*  
JI
- Zemlja publikovanja:  
*Srbija*  
ZP
- Uže geografsko područje:  
*Vojvodina*  
UGP
- Godina:  
2003.  
GO
- Izdavač:  
*Autorski reprint*  
IZ
- Mesto i adresa:  
*Prirodno-matematički fakultet,  
Trg Dositeja Obradovića 4, 21000 Novi Sad*  
MA
- Fizički opis rada:  
*(6/25/10/0/7/17/1)*  
FO
- Naučna oblast:  
*Fizika*  
NO
- Naučna disciplina:  
*Fizika čvrstog stanja*  
ND
- Predmetna odrednica / ključne reči:  
*molekulski filmovi, eksitonii,  
Grinove funkcije, spektri*  
PO
- Čuva se:  
*Biblioteka Instituta za fiziku,  
PMF Novi Sad*
- Izvod:  
*U radu je primjenjen metod dvovremen-  
skih Grinovih funkcija za ispitivanje uticaja  
granica film-struktura sa složenom kristalnom  
rešetkom na energetski spektar i moguća stanja  
eksitona. Dobijeni rezultati predstavljeni su  
grafički i izvršene su analize, odnosno poređe-  
nja tih rezultata sa odgovarajućim u idealnim  
beskonačnim (prostorno neograničenim) struk-  
turama. Na osnovu toga uočene su najbitnije  
razlike između njih.*  
IZ
- Datum prihvatanja teme od strane Veća:  
*16.07.2003.*  
DP
- Datum odbrane:  
*04.08.2003.*  
DO
- Članovi komisije:
  - Predsednik:  
*Dr Zoran Mijatović,  
vanred. profesor, PMF, Novi Sad*
  - Članovi:
    - Dr Jovan Šetrajčić,  
red. profesor, PMF, Novi Sad*
    - Dr Milica Pavkov,  
docent, PMF, Novi Sad*KO

**UNIVERSITY OF NOVI SAD**  
**FACULTY OF SCIENCES**  
**KEY WORDS DOCUMENTATION**

- Accession number:  
ANO
- Identification number:  
INO
- Document type:  
*Monograph type*  
DT
- Type of record:  
*Printed text*  
TR
- Contents Code:  
*Diploma work*  
CC
- Author:  
*Laza Rutonjski*  
AU
- Mentor:  
*Prof. Dr Jovan Šetrajčić*  
MN
- Title:  
*Exciton States in  
Bimolecular Crystalline Films*  
NR
- Language of text:  
*Serbian*  
LT
- Language of abstract:  
*English*  
LA
- Country of publication:  
*Serbia*  
CP
- Locality of publication:  
*Vojvodina*  
LP
- Publication year:  
2003.  
PY
- Publisher:  
*Author's reprint*  
PU
- Publ.place:  
*Novi Sad,  
Department of Physics,  
Faculty of Sciences,  
Trg Dositeja Obradovića 4*  
PP
- Physical description:  
(6/25/10/0/7/17/1)  
PD
- Scientific field:  
*Physics*  
SF
- Scientific discipline:  
*Solid State Physics*  
SD
- Key words:  
*molecular films, excitons,  
Green's functions, spectra*  
KW
- Holding data:  
*Library*  
*Department of Physics, Novi Sad*
- HD Note: N
- Abstract:  
*In this work, the method of the two-time dependent Green's functions was applied to researching of the influence of the surfaces of the film-structures with complex crystalline lattice on the energy spectra and possible exciton states. The obtained results are plotted and the analyzes are carried out, together with the comparison of those results to those obtained for the corresponding ideal, infinite, e.i. spatially unbounded structures. On the basis of those analyzes, the main differences between the structures are observed.*  
AB
- Accepted by the Scientific Board on:  
16.07.2003.  
ASB
- Defended:  
04.08.2003.  
DE
- Work defend board:
  - DB President:  
*Dr. Zoran Mijatović,  
Associated Professor, Faculty of Sciences,  
University of Novi Sad*
  - Member:  
*Dr. Jovan Šetrajčić,  
Full Professor, Faculty of Sciences,  
University of Novi Sad*
  - Member:  
*Dr. Milica Pavkov,  
Assistant Professor, Faculty of Sciences,  
University of Novi Sad*