



UNIVERZITET U NOVOM SADU  
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET  
DEPARTMAN ZA FIZIKU



УНИВЕРЗИТЕТ У НОВОМ САДУ  
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ

ПРИМЉЕНО:	12 СЕП 2003
ОРГАНИЗ.ЈЕД.	БРОЈ
ФФФФ	9/452

Lidija Vukosavljević

## EKSITONSKA STANJA U MONOMOLEKULSKIM KRISTALNIM FILMOVIMA

- diplomski rad -

Novi Sad, 2003.

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

- *DIPLOMSKI RAD* -

**EKSITONSKA STANJA U  
MONOMOLEKULSKIM KRISTALNIM FILMOVIMA**

MENTOR

PROF. DR JOVAN ŠETRAJČIĆ

KANDIDAT

LIDIJA VUKOSAVLJEVIĆ

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 niskodimenzioni kristalni sistemi (ultratanki filmovi, superrešetke, te kvantne žice i tačke).

Današnji razvoj tehnike i tehnologije omogućava pravljenje ovakvih kvantnih sistema, eksperimentalni 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 aparatu. 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 prostom kristalnom rešetkom.

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

Novi Sad, 08.09.2003.

Lidija Vukosavljević

## Sadržaj

<b>1</b>	<b>Uvod</b>	<b>4</b>
<b>2</b>	<b>Eksitoni u balku</b>	<b>5</b>
2.1	Grinove funkcije sistema . . . . .	5
2.2	Zakon disperzije . . . . .	8
<b>3</b>	<b>Eksitoni u tankim filmovima</b>	<b>10</b>
3.1	Model monomolekulskog filma . . . . .	10
3.2	Zakon disperzije . . . . .	12
3.3	Spektralne težine eksitonskih stanja . . . . .	14
<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. Primenjeni 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 primitivnom rešetkom, a zatim isti metod primenjen na film-strukture sa identičnom rešetkom.

---

<sup>1</sup>Filmovi predstavljaju beskonačne strukture u svim kristalnim ravnima paralelnim dvema graničnim površinama, koje su normalne na jedan prioritetan 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 proporcioni recipročnim vrednostima vremena života tih ekscitacija.

## 2 Eksitoni u balku

Razmatramo svojstva eksitonskog podsistema idealnog beskonačnog kubnog kristala polazeći od standardnog eksitonskog hamiltonijana 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 matricni 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, naprimer,  $i = 2$  (ostali članovi sume dobijaju se analognim računanjem).

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

Na osnovu toga računamo:

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

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

$$i\hbar \frac{d}{dt} \Gamma_{\bar{n}\bar{m}}(t) = i\hbar\delta(t)\delta_{\bar{n}\bar{m}} \left(1 - 2\langle P_{\bar{n}}^+ P_{\bar{n}} \rangle\right) + \Delta_{\bar{n}} \Gamma_{\bar{n}\bar{m}}(t) + \quad (2.7)$$

$$+ \sum_{\bar{l}} X_{\bar{n}\bar{l}} \Gamma_{\bar{l}\bar{m}}(t) - 2 \sum_{\bar{l}} X_{\bar{n}\bar{l}} T_{\bar{n}\bar{n}\bar{l}\bar{m}}(t) + 2 \sum_{\bar{l}} Y_{\bar{n}\bar{l}} T_{\bar{l}\bar{l}\bar{n}\bar{m}}(t).$$

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:

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

$$P^+ P = \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-2)^\nu}{(1+\nu)!} (B^+)^{\nu+1} B^{\nu+1}. \quad (2.8)$$

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

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

Na taj način dobijamo:

$$\Gamma_{\bar{n}\bar{m}}(t) = \langle\langle P_{\bar{n}}(t) | P_{\bar{m}}^+(0)\rangle\rangle =$$

$$= \langle\langle B_{\bar{n}}(t) | B_{\bar{m}}^+(0)\rangle\rangle - \langle\langle B_{\bar{n}}(t) | B_{\bar{m}}^+(0)B_{\bar{m}}^+(0)B_{\bar{m}}(0)\rangle\rangle - \quad (2.10)$$

$$- \langle\langle B_{\bar{n}}^+(t)B_{\bar{n}}(t)B_{\bar{n}}(t) | B_{\bar{m}}^+(0)\rangle\rangle + \langle\langle B_{\bar{n}}^+(t)B_{\bar{n}}(t)B_{\bar{n}}(t) | B_{\bar{m}}^+(0)B_{\bar{m}}^+(0)B_{\bar{m}}(0)\rangle\rangle.$$

Dekuplovanjem viših Grinovih funkcija pomoću poznatih Boze-komutacionih relacija:

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

članovi u izrazu (2.10) postaju:

$$\text{- prvi član} \quad \langle\langle B_{\bar{n}}(t) | B_{\bar{m}}^+(0)\rangle\rangle = G_{\bar{n}\bar{m}}(t), \quad (2.12)$$

gde je  $G_{\bar{n}\bar{m}}(t)$  retardovana Grinova funkcija, - drugi član

$$\langle\langle B_{\bar{n}}(t) | B_{\bar{m}}^+(0)B_{\bar{m}}^+(0)B_{\bar{m}}(0)\rangle\rangle = \Theta(t)\langle\langle [B_{\bar{n}}, B_{\bar{m}}^+ B_{\bar{m}}^+ B_{\bar{m}}] \rangle\rangle = \quad (2.13)$$

$$= \Theta(t) \left( \langle\langle (\delta_{\bar{n}\bar{m}} + B_{\bar{m}}^+ B_{\bar{n}}) B_{\bar{m}}^+ B_{\bar{m}} \rangle\rangle - \langle\langle B_{\bar{m}}^+ B_{\bar{m}}^+ B_{\bar{m}} B_{\bar{n}} \rangle\rangle \right) = 2G_{\bar{n}\bar{m}}(t)\mathcal{N}_0,$$

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

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

$$\text{- treći član} \quad \langle\langle B_{\bar{n}}^+(t)B_{\bar{n}}(t)B_{\bar{n}}(t) | B_{\bar{m}}^+(0)\rangle\rangle = 2G_{\bar{n}\bar{m}}(t)\mathcal{N}_0, \quad (2.15)$$

$$\text{- četvrti član} \langle\langle B_{\bar{n}}^+(t)B_{\bar{n}}(t)B_{\bar{n}}(t) | B_{\bar{m}}^+(0)B_{\bar{m}}^+(0)B_{\bar{m}}(0)\rangle\rangle = 2R_{\bar{n}\bar{m}}(t)G_{\bar{n}\bar{m}}^2(t), \quad (2.16)$$

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

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

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:

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

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

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_{\bar{a}\bar{a}\bar{b}\bar{c}} &= \langle\langle P_{\bar{a}}^+(t)P_{\bar{a}}(t)P_{\bar{b}}(t) | P_{\bar{c}}^+(0)\rangle\rangle = \langle\langle B_{\bar{a}}^+(t)B_{\bar{a}}(t)B_{\bar{b}}(t) | B_{\bar{c}}^+(0)\rangle\rangle - \\ &- \langle\langle B_{\bar{a}}^+(t)B_{\bar{a}}(t)B_{\bar{b}}(t) | B_{\bar{c}}^+(0)B_{\bar{c}}^+(0)B_{\bar{c}}(0)\rangle\rangle = \\ &= \mathcal{N}_0G_{\bar{b}\bar{c}}(t) + \mathcal{N}_{\bar{b}\bar{a}}G_{\bar{a}\bar{c}}(t) - 2R_{\bar{a}\bar{c}}(t)G_{\bar{b}\bar{c}}(t)G_{\bar{a}\bar{c}}(t) + O(\mathcal{N}_0^2). \end{aligned} \quad (2.19)$$

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

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \left[ (1 - 4\mathcal{N}_0)G_{\bar{n}\bar{m}}(t) + 2R_{\bar{n}\bar{m}}(t)G_{\bar{n}\bar{m}}^2(t) \right] &= i\hbar\delta(t)\delta_{\bar{n}\bar{m}} \left( 1 - 2\langle P_{\bar{n}}^+P_{\bar{n}} \rangle \right) + \\ + \Delta_{\bar{n}} \left[ (1 - 4\mathcal{N}_0)G_{\bar{n}\bar{m}}(t) + 2R_{\bar{n}\bar{m}}(t)G_{\bar{n}\bar{m}}^2(t) \right] &+ \\ + \sum_{\bar{l}} X_{\bar{n}\bar{l}} \left[ (1 - 4\mathcal{N}_0)G_{\bar{l}\bar{m}}(t) + 2R_{\bar{l}\bar{m}}(t)G_{\bar{l}\bar{m}}^2(t) \right] - & \\ - 2 \sum_{\bar{l}} X_{\bar{n}\bar{l}} \left[ \mathcal{N}_0G_{\bar{l}\bar{m}}(t) + \mathcal{N}_{\bar{l}\bar{n}}G_{\bar{n}\bar{m}}(t) - 2R_{\bar{n}\bar{m}}(t)G_{\bar{l}\bar{m}}(t)G_{\bar{n}\bar{m}}(t) \right] + & \\ + 2 \sum_{\bar{l}} Y_{\bar{n}\bar{l}} \left[ \mathcal{N}_0G_{\bar{n}\bar{m}}(t) + \mathcal{N}_{\bar{n}\bar{l}}G_{\bar{l}\bar{m}}(t) - 2R_{\bar{l}\bar{m}}(t)G_{\bar{n}\bar{m}}(t)G_{\bar{l}\bar{m}}(t) \right]. & \end{aligned} \quad (2.20)$$

Gornju jednačinu ćemo rešavati u najnižoj aproksimaciji:

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

takodje je:

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

i proizvodi Grinovih funkcija:

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

Dekuplovana jednačina je tada:

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



## 2.2 Zakon disperzije

Vršimo vremenske Furije transformacije tipa:

$$\delta(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega t}; \quad f_{\vec{a}\vec{b}}(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega f_{\vec{a}\vec{b}}(\omega) e^{-i\omega t}, \quad (2.22)$$

nakon čega dobijamo:

$$\hbar\omega G_{\vec{n}\vec{m}}(\omega) = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{\vec{n}\vec{m}} + \Delta_{\vec{n}} G_{\vec{n}\vec{m}}(\omega) + \sum_{\vec{l}} X_{\vec{n}\vec{l}} G_{\vec{l}\vec{m}}(\omega). \quad (2.23)$$

Korišćenjem aproksimacije najbližih suseda ( $\vec{l} \rightarrow \vec{n} \pm \vec{\lambda}_i$ ):

$$\vec{n} \pm \vec{\lambda}_1 = n_x \pm 1, n_y, n_z; \quad \vec{n} \pm \vec{\lambda}_2 = n_x, n_y \pm 1, n_z; \quad \vec{n} \pm \vec{\lambda}_3 = n_x, n_y, n_z \pm 1,$$

gornja jednačina prelazi u:

$$\begin{aligned} \hbar\omega G_{n_x n_y n_z, m_x m_y m_z}(\omega) &= \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{n_x n_y n_z, m_x m_y m_z} + \Delta_{n_x n_y n_z} G_{n_x n_y n_z, m_x m_y m_z}(\omega) + \\ &+ \left[ X_{n_x n_y n_z, n_x+1, n_y n_z} G_{n_x+1, n_y n_z, m_x m_y m_z}(\omega) + X_{n_x n_y n_z, n_x-1, n_y n_z} G_{n_x-1, n_y n_z, m_x m_y m_z}(\omega) + \right. \\ &+ X_{n_x n_y n_z, n_x n_y+1, n_z} G_{n_x n_y+1, n_z, m_x m_y m_z}(\omega) + X_{n_x n_y n_z, n_x n_y-1, n_z} G_{n_x n_y-1, n_z, m_x m_y m_z}(\omega) + \\ &\left. + X_{n_x n_y n_z, n_x n_y n_z+1} G_{n_x n_y n_z+1, m_x m_y m_z}(\omega) + X_{n_x n_y n_z, n_x n_y n_z-1} G_{n_x n_y n_z-1, m_x m_y m_z}(\omega) \right]. \end{aligned} \quad (2.24)$$

Pošto je u pitanju neograničen kristal koristimo potpunu prostornu Furije-transformaciju:

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

i uzimajući u obzir da posmatramo idealnu kubnu strukturu gde je energija eksitona na svakom čvoru ista, kao što je i transfer energije medju susedima isti:

$$\Delta_{\vec{a}} \equiv \Delta; \quad X_{\vec{a}, \vec{a} \pm \vec{\lambda}_i} \equiv X_i; \quad i \in \{x, y, z\},$$

jednačina (2.24) prelazi u:

$$\begin{aligned} \hbar\omega \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} G_{\vec{k}}(\omega) e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})} &= \frac{i\hbar}{2\pi} \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})} + \Delta \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} G_{\vec{k}}(\omega) e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})} + \\ &+ \left[ X_x \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} G_{\vec{k}}(\omega) e^{i(k_x \vec{e}_x + k_y \vec{e}_y + k_z \vec{e}_z) \{a_x [(n_x+1)-m_x] \vec{e}_x + a_y (n_y - m_y) \vec{e}_y + a_z (n_z - m_z) \vec{e}_z\}} + \right. \\ &+ X_x \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} G_{\vec{k}}(\omega) e^{i(k_x \vec{e}_x + k_y \vec{e}_y + k_z \vec{e}_z) \{a_x [(n_x-1)-m_x] \vec{e}_x + a_y (n_y - m_y) \vec{e}_y + a_z (n_z - m_z) \vec{e}_z\}} + \\ &+ X_y \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} G_{\vec{k}}(\omega) e^{i(k_x \vec{e}_x + k_y \vec{e}_y + k_z \vec{e}_z) \{a_x (n_x - m_x) \vec{e}_x + a_y [(n_y+1)-m_y] \vec{e}_y + a_z (n_z - m_z) \vec{e}_z\}} + \\ &+ X_y \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} G_{\vec{k}}(\omega) e^{i(k_x \vec{e}_x + k_y \vec{e}_y + k_z \vec{e}_z) \{a_x (n_x - m_x) \vec{e}_x + a_y [(n_y-1)-m_y] \vec{e}_y + a_z (n_z - m_z) \vec{e}_z\}} + \\ &+ X_z \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} G_{\vec{k}}(\omega) e^{i(k_x \vec{e}_x + k_y \vec{e}_y + k_z \vec{e}_z) \{a_x (n_x - m_x) \vec{e}_x + a_y (n_y - m_y) \vec{e}_y + a_z [(n_z+1)-m_z] \vec{e}_z\}} + \\ &\left. + X_z \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} G_{\vec{k}}(\omega) e^{i(k_x \vec{e}_x + k_y \vec{e}_y + k_z \vec{e}_z) \{a_x (n_x - m_x) \vec{e}_x + a_y (n_y - m_y) \vec{e}_y + a_z [(n_z-1)-m_z] \vec{e}_z\}} \right]. \end{aligned} \quad (2.26)$$

Sredjivanjem gornje jednačine dobijamo:

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

Iz ove jednačine možemo izraziti Grinovu funkciju:

$$G_{\vec{k}}(\omega) = \frac{i\hbar}{2\pi} \frac{1}{\hbar\omega - \Delta - 2 [X_x \cos a_x k_x + X_y \cos a_y k_y + X_z \cos a_z k_z]}. \quad (2.28)$$

Energiju eksitona u balku dobijamo ako izračunamo realni deo pola Grinove funkcije:

$$\hbar\omega = \Delta + 2 [X_x \cos a_x k_x + X_y \cos a_y k_y + X_z \cos a_z k_z]. \quad (2.29)$$

Radi lakšeg poređenja sa zakonom disperzije eksitona u filmu, ovaj izraz ćemo napisati u jednostavnijoj ( $X_x = X_y = X_z \equiv -|X|$ ;  $a_x = a_y = a_z \equiv a$ ) i bezdimenzionoj formi:

$$\mathcal{E}_{\vec{k}} \equiv \frac{\hbar\omega - \Delta}{|X|} = \mathcal{F}_{xy} + \mathcal{G}_z, \quad (2.30)$$

$$\mathcal{F}_{xy} = -2(\cos ak_x + \cos ak_y); \quad \mathcal{G}_z = -2 \cos ak_z.$$

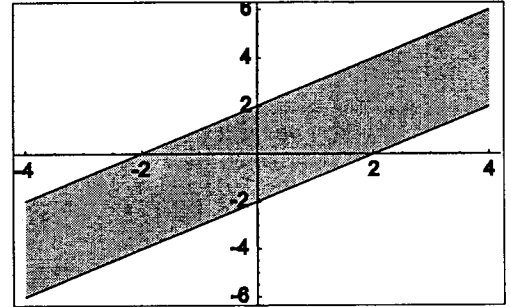
Ovaj zakon disperzije prikazan je na (slika 2.1), u stručnoj literaturi, uobičajen način:

$$\mathcal{E}_{\vec{k}} = \mathcal{E}_z(\mathcal{F}_{xy}),$$

dakle u funkciji dvodimenzione ( $xy$ ) veličine  $\mathcal{F}$ . Vidi se da za  $ak_i \in [0, +\pi]$ ,  $i = x, y, z$  (prva Brillouinova zona), ove veličine leže u intervalima:

$$\mathcal{F}_{xy} \in [-4, +4]; \quad \mathcal{G}_z \in [-2, +2],$$

pa je  $\mathcal{E}_{\vec{k}} \in [-6, +6]$ .



Slika 2.1: Zakon disperzije eksitona u monomolekulskom kristalu

Uočljivo je postojanje zone dozvoljenih (kontinualnih) energetske nivoa.

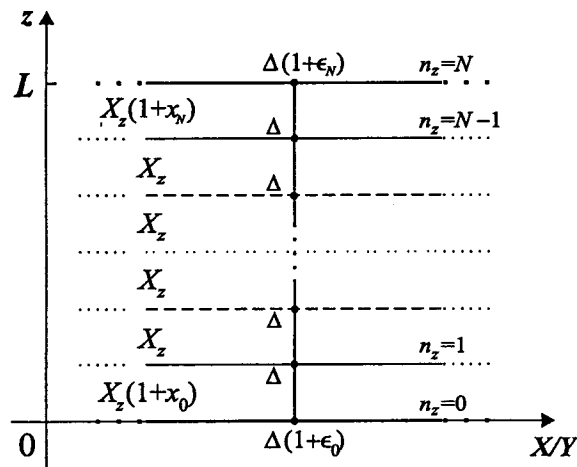
### 3 Eksitoni u tankim filmovima

U prethodnoj glavi izračunate su energije eksitona, odnosno njihov zakon disperzije u neograničenim kristalnim strukturama. Primenjujući isti pristup ovde ćemo odrediti iste karakteristike ovih pobudjenja, ali u kristalnim film-strukturama.

Za razliku od idealnih beskonačnih struktura, realni kristali ne poseduju osobinu translacione invarijantnosti. Postojanje izvesnih graničnih uslova, jedan je od uzroka narušenja simetrije. Sistemi koji imaju dve paralelne granične površine nazivaju se filmovima. Posmatra se idealni tanki film kubne kristalne strukture, načinjen na substratu nekim tehnološkim postupkom (naparavanjem, raspršivanjem i sl.). Pojam idealni ovde se koristi u smislu nepostojanja narušenja unutrašnje kristalne strukture (bez prisustva defekata, primesa i sl.), a ne u smislu prostorne neograničenosti i nepostojanja narušenja translacione invarijantnosti relevantnih energetskih parametara sistema. Dimenzije filma su takve da je on u  $XY$  ravnima beskonačan, a u  $z$ -pravcima ima konačnu debljinu ( $L$ ). Znači da ovaj film poseduje dve beskonačne granične površi paralelne  $XY$ -ravnima i to za:  $z = 0$  i  $z = L$

#### 3.1 Model monomolekulskog filma

Film-struktura sa primitivnom kristalnom rešetkom (jedan molekul po elementarnoj ćeliji) sa naznačenim graničnim parametrima prikazana je na slici 3.1.



Slika 3.1: Presek modela monomolekulskog kristalnog filma u  $X(Y)Z$  ravni

Za izračunavanje eksitonskih energija u ovom filmu polazimo od jednačine (2.24) gde, zbog izmenjenih uslova na granicama posmatrane strukture, uzimamo da su perturbacione energije eksitona u graničnim ( $n_z = 0$ ;  $n_z = N$ ) i njima susednim ravnima ( $n_z = 1$ ;  $n_z = N - 1$ ):

$$\begin{aligned}
 \Delta_{\bar{n}} &\equiv \Delta(1 + \epsilon_0 \delta_{n_z,0} + \epsilon_N \delta_{n_z,N}) ; \\
 X_{\bar{n}, \bar{n} + \bar{\lambda}_z} &\equiv X_z(1 + x_0 \delta_{n_z,0} + x_N \delta_{n_z,N-1}) ; \\
 X_{\bar{n}, \bar{n} - \bar{\lambda}_z} &\equiv X_z(1 + x_0 \delta_{n_z,1} + x_N \delta_{n_z,N}) .
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

Veličine parametara  $\epsilon$  definišu promenu energije izolovanog molekula na graničnim površima, a  $x$  perturbaciju, odnosno promenu energije transfera eksitona iz prvih unutrašnjih ka graničnim površima, tj. u graničnim slojevima duž  $z$ -pravca.

Pošto su granične površi filma uzete normalno na  $z$ -pravac, indeks sloja  $n_z$  u (3.1) uzima vrednosti  $n_z = 0, 1, 2, \dots, N$ , gde je  $N \in [2, 20]$  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 može da se koristi samo delimična prostorna Furije-transformacija:

$$\begin{aligned} \delta_{\vec{n}\vec{m}} &= \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} e^{ik_x a_x (n_x - m_x)} e^{ik_y a_y (n_y - m_y)} \delta_{n_z m_z}; \\ f_{\vec{n}\vec{m}}(\omega) &= \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} e^{ik_x a_x (n_x - m_x)} e^{ik_y a_y (n_y - m_y)} f_{n_z m_z}(k_x, k_y, \omega). \end{aligned} \quad (3.2)$$

Prilikom delimične Furije-transformacije jednačine (2.24), radi kraćeg pisanja zgodno je uvesti oznake  $G_{n_z m_z}(k_x, k_y, \omega) \equiv G_{n_z m_z}$ . Na taj način se dobija:

$$\begin{aligned} &\hbar\omega \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} e^{ik_x a_x (n_x - m_x)} e^{ik_y a_y (n_y - m_y)} G_{n_z m_z} = \\ &= \frac{i\hbar}{2\pi} \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} e^{ik_x a_x (n_x - m_x)} e^{ik_y a_y (n_y - m_y)} \delta_{n_z m_z} + \\ &+ \Delta (1 + \epsilon_0 \delta_{n_z, 0} + \epsilon_N \delta_{n_z, N}) \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} e^{ik_x a_x (n_x - m_x)} e^{ik_y a_y (n_y - m_y)} G_{n_z, m_z} + \\ &+ X_x \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} e^{ik_x a_x (n_x + 1 - m_x)} e^{ik_y a_y (n_y - m_y)} G_{n_z, m_z} + \\ &+ X_x \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} e^{ik_x a_x (n_x - 1 - m_x)} e^{ik_y a_y (n_y - m_y)} G_{n_z, m_z} + \\ &+ X_y \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} e^{ik_x a_x (n_x - m_x)} e^{ik_y a_y (n_y + 1 - m_y)} G_{n_z, m_z} + \\ &+ X_y \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} e^{ik_x a_x (n_x - m_x)} e^{ik_y a_y (n_y - 1 - m_y)} G_{n_z, m_z} + \\ &+ X_z (1 + x_0 \delta_{n_z, 0} + x_N \delta_{n_z, N-1}) \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} e^{ik_x a_x (n_x - m_x)} e^{ik_y a_y (n_y - m_y)} G_{n_z + 1, m_z} + \\ &+ X_z (1 + x_0 \delta_{n_z, 1} + x_N \delta_{n_z, N}) \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} e^{ik_x a_x (n_x - m_x)} e^{ik_y a_y (n_y - m_y)} G_{n_z - 1, m_z}. \end{aligned} \quad (3.3)$$

Daljim sredjivanjem se dobija:

$$\begin{aligned} &G_{n_z m_z} \left[ -\frac{\hbar\omega - \Delta - 2(X_x \cos a_x k_x + X_y \cos a_y k_y)}{X_z} + \frac{\Delta}{X_z} (\epsilon_0 \delta_{n_z, 0} + \epsilon_N \delta_{n_z, N}) \right] + \\ &+ G_{n_z + 1, m_z} (1 + x_0 \delta_{n_z, 0} + x_N \delta_{n_z, N-1}) + \\ &+ G_{n_z - 1, m_z} (1 + x_0 \delta_{n_z, 1} + x_N \delta_{n_z, N}) = -\frac{i\hbar}{2\pi X_z} \delta_{n_z, m_z}, \end{aligned} \quad (3.4)$$

a uz  $X_x = X_y = X_z \equiv -|X|$  i  $a_x = a_y = a_z \equiv a$ :

$$\begin{aligned} & G_{n_z m_z} \left[ \varrho - \frac{\Delta}{|X|} (\epsilon_0 \delta_{n_z,0} + \epsilon_N \delta_{n_z,N}) \right] + \\ & + G_{n_z+1, m_z} (1 + x_0 \delta_{n_z,0} + x_N \delta_{n_z,N-1}) + \\ & + G_{n_z-1, m_z} (1 + x_0 \delta_{n_z,1} + x_N \delta_{n_z,N}) = \frac{i\hbar}{2\pi |X|} \delta_{n_z, m_z}, \end{aligned} \quad (3.5)$$

gde je uvedena smena:

$$\varrho = \frac{\hbar\omega - \Delta}{|X|} + 2(\cos ak_x + \cos ak_y). \quad (3.6)$$

Jednačina (3.5) predstavlja ustvari sistem od  $N + 1$  nehomogenih algebarsko-diferencnih jednačina sa (početno-graničnim) uslovima:  $G_{n_z, m_z} = 0$ , za  $n_z < 0$  i  $n_z > N + 1$ .

### 3.2 Zakon disperzije

U cilju nalaženja eksitonskih energija potrebni su nam polovi Grinovih funkcija, koji se dobijaju kada iste teže beskonačnosti, što znači da mora biti:

$$\mathcal{D}_{N+1} \equiv 0, \quad (3.7)$$

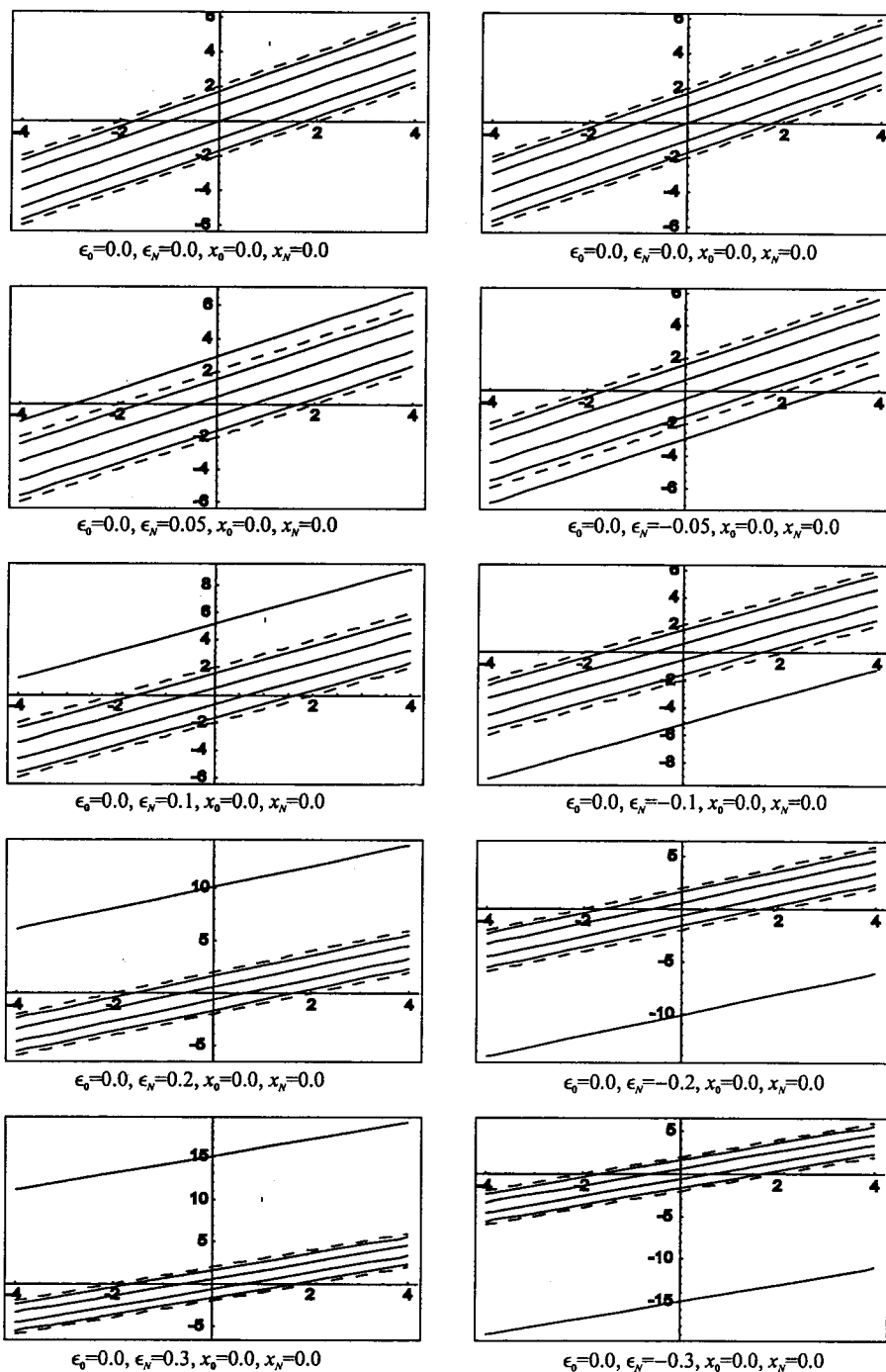
gde je determinanta sistema (3.5) data u sledećem obliku:

$$\mathcal{D}_{N+1}(\varrho) = \begin{vmatrix} \varrho - \frac{\Delta}{|X|}\epsilon_0 & 1 + x_0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 + x_0 & \varrho & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \varrho & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \ddots & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & \varrho & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & \varrho & 1 + x_N \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 + x_N & \varrho - \frac{\Delta}{|X|}\epsilon_N \end{vmatrix}_{N+1} \quad (3.8)$$

Uslov (3.7) rešavaćemo za slučaj perturbovanog monomolekulskog filma sa pet kristalnih ravni duž  $z$ -pravca ( $N = 4$ ). Granični parametri će biti menjani u sledećim intervalima:  $\{\epsilon_0, \epsilon_N\} \in [-0.3, +0.3]$  (promena energije  $\Delta$  na graničnim ravnima – do 30 % i to na manje i na više),  $\{x_0, x_N\} \in [-0.8, +2.0]$  (promena energije transfera  $X$  u graničnim slojevima – do 80 % naniže i do 200 % naviše)<sup>4</sup>.

<sup>4</sup>Energije transfera u graničnim slojevima ( $X$ ) ne mogu se smanjiti više od 99,99 %, jer i u tom sličaju praktično ne postoje interakcije molekula sa graničnih i njima susednih unutar-filmskih ravni. Ukoliko bi se uzelo  $\{x_0, x_N\} \leq -1$ , onda bi se karakter međumolekulske interakcije promenio (privlačna  $\Leftrightarrow$  odbojna). Ukoliko bi se uzelo  $\{x_0, x_N\} \geq 2$ , onda bi se jako narušio odnos veličina  $\Delta$  i  $X$ , a to bi značilo da se promenio i tip molekulske kristala u kome se formiraju Frenkelovi eksitoni i koji se ovde razmatraju.

Proračuni su, zbog nemogućnosti nalaženja analitičkog rešenja, radjeni uz pomoć programskog paketa *MATHEMATICA* 4.0, a grafički obradjeni pomoću *COREL* 9.0 i tekstualno sredjeni u *MIKTEX* 2e. Rezultati ovih proračuna su prikazani na slikama 3.2 i 3.3. Kao i kod odgovarajućih balk-kristalnih struktura, i ovde se na ordinatama nalaze vrednosti redukovanih energija  $\mathcal{E}_\nu^* = \frac{\hbar\omega - \Delta}{|X|} \equiv \varrho_\nu - \mathcal{F}_{xy}^*$ ;  $\nu = 1, 2, 3 \dots, N + 1$ ; u zavisnosti od bezdimenzione funkcije  $\mathcal{F}_{xy}^* \equiv 2(\cos ak_x + \cos ak_y)$  na apscisama grafika.



Slika 3.2: Eksitonske energije monomolekulskog filma

Na slici 3.2 prikazane su redukovane energije eksitona petoslojnog monomolekulskog filma (punim linijama) u zavisnosti od dvodimenzione 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.  $\Delta_{0,N} = (1 + \epsilon_{0,N})\Delta$ . Pošto je promena ovih spektara izmenom parametra  $\epsilon_0$  ista kao i izmenom  $\epsilon_N$  ovde je data samo zavisnost od  $\epsilon_N$ . 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 jedan energetski nivo „izbacuje” van 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. Ovakva izdvojena stanja su poznata pod nazivom tamovska ili 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. Zbog toga će ova analiza biti posebno uradjena u sledećem paragrafu.

Iz svih prikazanih grafika je uočljiva diskretnost energetskih stanja eksitona u filmovima. Za razliku od kontinualne balkovske zone ovde se može javiti onoliko energetskih nivoa koliko ima dvodimenzionih stanja, a mi smo razmatrali slučaj petoslojnog filma, dakle sa pet mogućih energetskih nivoa.

Prva (gornja) dva grafika predstavljaju moguće energije eksitona neperturbovanog monomolekulskog filma. U literaturi ovakva film-struktura naziva se idealan film. Ove strukture su zanimljive zbog toga što se tu energetski spektri elementarnih pobudjenja mogu izraziti u analitičkom obliku.

### 3.3 Spektralne težine eksitonskih stanja

U cilju analize prostorne raspodele eksitona, tj. verovatnoća nalaženja eksitona sa određenim energijama na pojedinim slojevima kristalnog filma, potrebno je izračunati spektralne težine pojedinih Grinovih funkcija. Polazi se od sistema jednačina za eksitonske Grinove funkcije, koji je sad najpogodnije predstaviti u matricnom obliku:

$$\hat{\mathcal{D}}_{N+1} \tilde{\mathcal{G}}_{N+1} = \tilde{\mathcal{K}}_{N+1}, \quad (3.9)$$

gde su:  $\hat{\mathcal{D}}_{N+1}$  – matrica koja odgovara determinanti sistema  $\mathcal{D}_{N+1}$ , a  $\tilde{\mathcal{G}}_{N+1}$  i  $\tilde{\mathcal{K}}_{N+1}$  – vektori Grinovih funkcija i Kronekerovih delti:

$$\tilde{\mathcal{G}}_{N+1} = \begin{pmatrix} G_{0,m_z} \\ G_{1,m_z} \\ \vdots \\ G_{n_z,m_z} \\ \vdots \\ G_{N,m_z} \end{pmatrix}; \quad \tilde{\mathcal{K}}_{N+1} = -\frac{i\hbar}{2\pi |X|} \begin{pmatrix} \delta_{0,m_z} \\ \delta_{1,m_z} \\ \vdots \\ \delta_{n_z,m_z} \\ \vdots \\ \delta_{N,m_z} \end{pmatrix}.$$

Dejstvom inverzne matrice  $\hat{D}_{N+1}^{-1}$ , s leve strane, na jednačinu (3.9) sledi:

$$\tilde{G}_{N+1} = \hat{D}_{N+1}^{-1} \tilde{K}_{N+1}. \quad (3.10)$$

Kako se inverzna matrica može izraziti preko adjugovane, čiji su članovi  $D_{ik}$  kofaktori elementa  $d_{ik}$  direktne matrice, može se pisati:

$$G_{n_z, m_z} = \frac{1}{\mathcal{D}_{N+1}} \sum_q D_{n_z, q} K_{q, m_z} = -\frac{1}{\mathcal{D}_{N+1}} \frac{i\hbar}{2\pi |X|} \sum_q D_{n_z, q} \delta_{q, m_z} = -\frac{i\hbar}{2\pi |X|} \frac{D_{n_z, m_z}}{\mathcal{D}_{N+1}}. \quad (3.11)$$

Kofaktori  $D_{n_z, m_z}$  se izračunavaju na osnovu poznavanja determinante sistema  $D_{N+1}$ .

Kako su za ravnotežne procese u sistemu bitne samo dijagonalne Grinove funkcije  $G_{n_z; n_z} \equiv G_{n_z}$ , izračunavanje kofaktora  $D_{n_z, m_z} \equiv D_{n_z}$  se znatno pojednostavljuje. Dobija se da su jednaki proizvodu dve pomoćne determinante:

$$D_{n_z} = B_{n_z} B_{N-n_z}, \quad (3.12)$$

gde su:

$$B_{n_z}(\varrho) = \begin{vmatrix} \varrho - \frac{\Delta}{|X|} \epsilon_0 & 1 + x_0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 1 + x_0 & \varrho & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \varrho & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \ddots & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \ddots & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \varrho & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & \varrho & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & \varrho \end{vmatrix}_{n_z} \quad (3.13)$$

$$B_{N-n_z}(\varrho) = \begin{vmatrix} \varrho & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & \varrho & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \varrho & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \ddots & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \ddots & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \varrho & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & \varrho & 1 + x_N \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 + x_N & \varrho - \frac{\Delta}{|X|} \epsilon_N \end{vmatrix}_{N-n_z} \quad (3.14)$$

s tim da je  $B_0 = B_{N-N} = 1$ .

U opštem slučaju, vrednost pomoćnih determinanti se može naći numerički, dok su Grinove funkcije perturbovanog filma:

$$G_{n_z} = -\frac{i\hbar}{2\pi |X|} \frac{B_{n_z} B_{N-n_z}}{\mathcal{D}_{N+1}}. \quad (3.15)$$



Grinove funkcije su multipolne, jer se u imeniocu nalazi polinom  $\mathcal{D}_{N+1}$  reda  $N + 1$ . Stoga se mora pribeći faktorizaciji na proste polove:

$$G_{n_z} = -\frac{i\hbar}{2\pi|X|} \sum_{\nu=1}^{N+1} \frac{g_{n_z;n_z}(\varrho_\nu)}{\varrho - \varrho_\nu}. \quad (3.16)$$

Spektralne težine  $g_{n_z;n_z}(\varrho_\nu) \equiv g_{n_z}^\nu$  se onda mogu izraziti preko:

$$g_{n_z}^\nu = \frac{B_{n_z}(\varrho_\nu)B_{N-n_z}(\varrho_\nu)}{\left. \frac{d}{d\varrho} \mathcal{D}_{N+1}(\varrho) \right|_{\varrho=\varrho(\nu)}}. \quad (3.17)$$

Spektralne težine Grinovih funkcija predstavljaju kvadrat modula talasne funkcije eksitona i omogućuju određivanje prostorne distribucije, tj. verovatnoće nalaženja eksitona sa određenim energijama po slojevima kristalnog filma. To je zapravo prostorna distribucija verovatnoće pojavljivanja određenih energetske stanja eksitona.

U sledećim tabelama su predstavljene vrednosti redukovanih energija i njima odgovarajućih spektralnih funkcija (prostorna raspodela verovatnoća) za petoslojni film. U slučaju perturbovanog filma, spektralne težine za date eksitonske energije se mogu naći samo numeričkim metodama. Rezultati dobijeni za razne vrednosti perturbovanih parametara filma dati su u tabelama 3.1-3.3 (pri čemu je  $k_x = k_y = 0$ ).

Tabela 3.1 daje prostornu distribuciju verovatnoća javljanja eksitonskih energija u idealnom monomolekulskom filmu.

Redukovana relativna ENERGIJA	$\epsilon_0 = 0.0; \epsilon_N = 0.0; x_0 = 0.0; x_N = 0.0$				
	1. sloj	2. sloj	3. sloj	4. sloj	5. sloj
-1.73205	0.08333	0.25000	0.33333	0.25000	0.08333
-1.00000	0.25000	0.25000	0.00000	0.25000	0.25000
0.00000	0.33333	0.00000	0.33333	0.00000	0.33333
1.00000	0.25000	0.25000	0.00000	0.25000	0.25000
1.73205	0.08333	0.25000	0.33333	0.25000	0.08333

Tabela 3.1: Verovatnoće nalaženja eksitona u idealnom petoslojnom filmu

Iz ove tabele se uočava da se za jednu određenu energiju verovatnoća pojavljivanja eksitona po svim slojevima jednaka jedinici, kao i da je verovatnoća po jednom sloju za sve energije takodje jednaka jedinici, tj:

$$\sum_{n_z=0}^N g_{n_z}^\nu = 1; \quad \sum_{\nu=1}^{N+1} g_{n_z}^\nu = 1. \quad (3.18)$$

U tabelama 3.2 i 3.3 prikazane su prostorne verovatnoće nalaženja eksitona u petoslojnom monomolekulskom filmu i to za slučaj kada se menjaju samo parametri  $\epsilon_0$  ili  $\epsilon_N$ , dok su ostali perturbacioni parametri jednaki nuli. Energije čije vrednosti se nalaze izvan balkovske zone (tj. lokalizovana eksitonska stanja), kao i najveće vrednosti verovatnoća (po slojevima filma) za te energije, su prikazani podebljanim brojevima. Povećanjem parametara  $\epsilon_0$  u intervalu od 5 do 30 % (tabele 3.2) vidi se da se i prostorna lokalizacija, tj. verovatnoća nalaženja eksitona, srazmerno povećava upravo na prvom sloju filma.

Redukovana relativna ENERGIJA	$\epsilon_0 = 0.05; \epsilon_N = 0.0; x_0 = 0.0; x_N = 0.0$				
	1. sloj	2. sloj	3. sloj	4. sloj	5. sloj
-1.65635	0.01047	0.18081	0.36241	0.32709	0.11922
-0.73601	0.03650	0.38225	0.06969	0.17975	0.33181
0.46207	0.06128	0.25449	0.23102	0.07974	0.37347
1.53408	0.05114	0.04807	0.31552	0.41016	0.17510
<b>2.89981</b>	<b>0.84061</b>	0.13437	0.02136	0.00327	0.00039
Redukovana relativna ENERGIJA	$\epsilon_0 = 0.1; \epsilon_N = 0.0; x_0 = 0.0; x_N = 0.0$				
	1. sloj	2. sloj	3. sloj	4. sloj	5. sloj
-1.64075	0.00371	0.16375	0.36362	0.34191	0.12701
-0.68389	0.01179	0.38088	0.09827	0.16222	0.34684
0.54116	0.01596	0.31736	0.18594	0.10890	0.37184
1.58374	0.00853	0.09961	0.35063	0.38692	0.15431
<b>5.20000</b>	<b>0.96000</b>	0.03840	0.00154	0.00006	$2.2 \cdot 10^{-6}$
Redukovana relativna ENERGIJA	$\epsilon_0 = 0.2; \epsilon_N = 0.0; x_0 = 0.0; x_N = 0.0$				
	1. sloj	2. sloj	3. sloj	4. sloj	5. sloj
-1.63052	0.00113	0.15231	0.36334	0.35115	0.13208
-0.65266	0.00330	0.37422	0.11685	0.15104	0.35459
0.58054	0.00386	0.34278	0.16164	0.12395	0.36777
1.60263	0.00171	0.12079	0.35807	0.37386	0.14556
<b>10.1000</b>	<b>0.99000</b>	0.00990	0.00001	$9.9 \cdot 10^{-7}$	$9.7 \cdot 10^{-9}$
Redukovana relativna ENERGIJA	$\epsilon_0 = 0.3; \epsilon_N = 0.0; x_0 = 0.0; x_N = 0.0$				
	1. sloj	2. sloj	3. sloj	4. sloj	5. sloj
-1.62664	0.00054	0.14793	0.36300	0.35454	0.13399
-0.64147	0.00152	0.37078	0.12368	0.14694	0.35709
0.59331	0.00169	0.34987	0.15366	0.12882	0.36596
1.60814	0.00071	0.12700	0.35964	0.36970	0.14296
<b>15.0667</b>	<b>0.99556</b>	0.00442	0.00002	$8.7 \cdot 10^{-8}$	$3.8 \cdot 10^{-10}$

Tabela 3.2: Verovatnoće nalaženja eksitona u perturbovanom petoslojnom filmu

U gornjoj tabeli (tabela 3.3) su prikazane verovatnoće nalaženja eksitona za slučaj kada je parametar  $\epsilon_N = 0.3$  i tu se jasno vidi da je u tom slučaju najveća verovatnoća nalaženja eksitona u zadnjem sloju filma. Donja tabela prikazuje raspored verovatnoća nalaženja eksitona za slučaj negativne perturbacije  $\epsilon_0 = -0.3$ , sa najvećom lokalizacijom na prvom sloju, ali je ovde, kao što je prethodno istaknuto, lokalizovani energetske nivo pomećen prema nižim energijama.

Ovde je važno istaći da povećanjem parametra  $\epsilon_0$  ( $\epsilon_N$ ) izrazito raste verovatnoća nalaženja eksitona na prvom (zadnjem) sloju. Naprimer, već za relativno malu vrednost  $\epsilon_0 = 0.05$  dobija se da će se eksiton naći na prvom sloju sa verovatnoćom od 84 %, dok je na zadnjem sloju ta verovatnoća 0.03 %.

Redukovana relativna ENERGIJA	$\epsilon_0 = 0.0; \epsilon_N = 0.3; x_0 = 0.0; x_N = 0.0$				
	1. sloj	2. sloj	3. sloj	4. sloj	5. sloj
-1.62664	0.13400	0.35454	0.36300	0.14793	0.00054
-0.64147	0.35709	0.14694	0.12368	0.37078	0.00152
0.59331	0.36596	0.12882	0.15366	0.34987	0.00169
1.60814	0.14296	0.36970	0.35964	0.12700	0.00071
<b>15.0667</b>	$3.8 \cdot 10^{-10}$	$8.7 \cdot 10^{-8}$	0.00002	0.00442	<b>0.99556</b>

Redukovana relativna ENERGIJA	$\epsilon_0 = -0.3; \epsilon_N = 0.0; x_0 = 0.0; x_N = 0.0$				
	1. sloj	2. sloj	3. sloj	4. sloj	5. sloj
<b>-15.0667</b>	<b>0.99556</b>	0.00442	0.00002	$8.7 \cdot 10^{-8}$	$3.8 \cdot 10^{-10}$
-1.60814	0.00071	0.12700	0.35964	0.36970	0.14296
-0.59331	0.00169	0.34987	0.15366	0.12882	0.36596
0.64147	0.00152	0.37078	0.12368	0.14694	0.35709
1.62664	0.00054	0.14793	0.36300	0.35454	0.13399

Tabela 3.3: b) Verovatnoće nalaženja eksitona u perturbovanom petoslojnom filmu

Iz svih tabela se može uočiti da se na svakom čvoru kristalnog sloja nalazi tačno jedan eksiton, koji može biti u  $N + 1 = 5$  različitih energetske stanja, sa različitim verovatnoćama nalaženja. Za proizvoljan broj slojeva filma ( $N + 1$ ) važi sledeća relacija, koja ukazuje na to da je zbir svih verovatnoća nalaženja eksitona jednak broju mogućih stanja:

$$\sum_{\nu=1}^{N+1} \sum_{n_z=0}^N g_{n_z}^{\nu}(\rho_{\nu}) = N + 1. \quad (3.19)$$

## 4 Zaključak

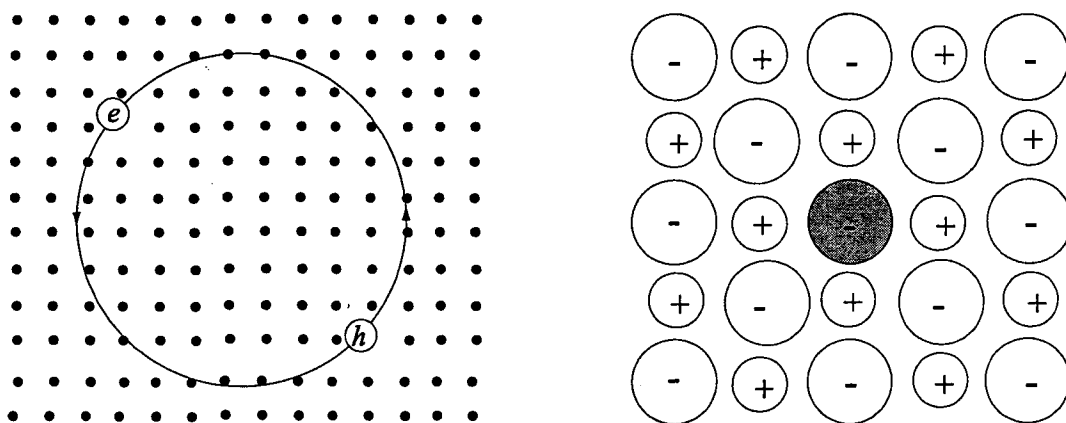
U radu su istraženi i analizirani energetske spektri (moguća energetska stanja) eksitona u dielektričnim, kristalnim, idealnim beskonačnim i film-strukturama, sa primitivnom kubnom rešetkom, na osnovu čega se došlo do sledećih važnijih rezultata.

1. Ove analize su pokazale bitne razlike u zakonu disperzije eksitona u pomenuta dva sistema, kao isključive posledice postojanja granica film-struktura, u kojima energetske spektri poseduju dva gepa. Veličine gepova zavise od debljine filma i od vrednosti izmana energetskih parametara na graničnim površima filma.
2. Postojanje graničnih uslova ima za posledicu promenu širine energetske zone eksitona. U odnosu na zonu dozvoljenih energija idealnih struktura sa praktično kontinualnim rasporedom, zona eksitonski dozvoljenih energija u filmu je izrazito diskretna 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  $\varepsilon$ ) dolazi do pomeranja energetskog spektra ka višim energijama (povećava se donji, a smanjuje gornji energetske gep).
4. Za neke vrednosti pomenutih parametara energetska zona eksitona izlazi van zone eksitonskih energija neograničenog kristala. U tom slučaju pojavljuju se lokalizovana eksitonska stanja. Energije ovih stanja zavise od debljine filma, ali je uočljiva i izražena zavisnost veličine energije lokalizovanih stanja eksitona od vrednosti graničnih energetskih parametara.
5. Ukoliko se pojave lokalizovana eksitonska stanja, onda su ona raspoređena duž graničnih kristalografskih ravni („površinska” stanja). Za pojavu „zapreminskih” stanja, u tom slučaju je verovatnoća zanemarivo mala.

## 5 Dodatak: Eksitoni u molekulskim kristalima

### 5.1 Eksitoni u kristalima

Apsorpcioni i refleksijski spektri često pokazuju strukturu za fotonsku energiju ispod energetskog gema, 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 poredjenju 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

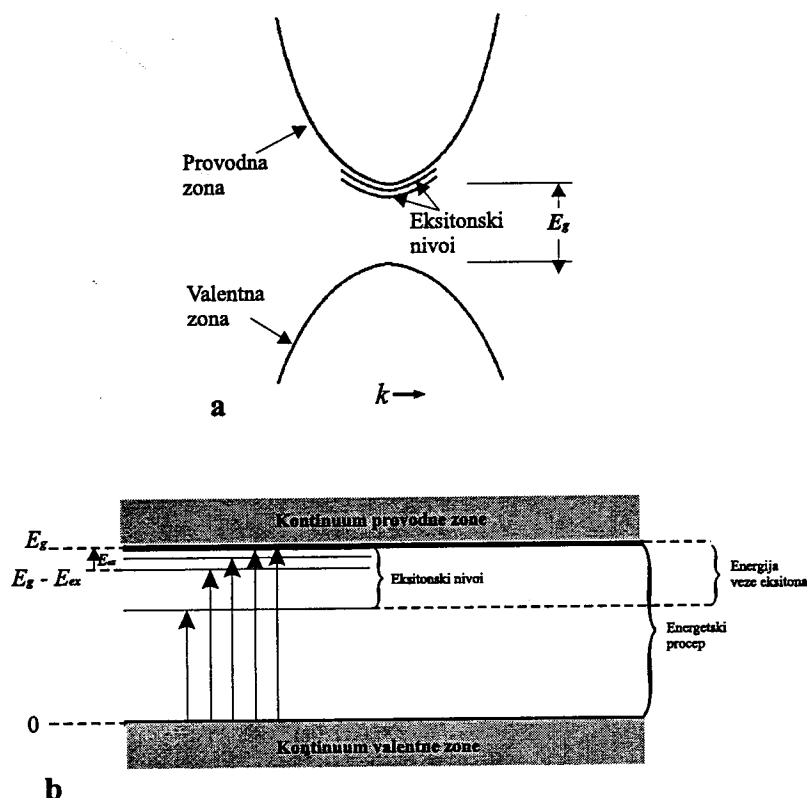
Eksiton se može kretati kroz kristal i prenositi energiju, ali eksiton ne prenosi naelektrisanje, jer je električno neutralan. On je sličan pozitronijumu koji je sastavljen od elektrona i pozitrona. Eksiton može biti formiran u svakom izolatoru. Svi eksitoni su nestabilni i imaju relativno malo vreme 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 gema. 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 gema su prikazani na slikama 5.2a i 5.2b. Slika 5.2a prikazuje eksitonske nivoe 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 nivoe eksitona čiji je centar masa u mirovanju. Optički prelazi sa vrha valentne zone su prikazani strelicama, najduža odgovara jonizaciji eksitona

pa prema tome i energetsom 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 oštre 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, upoređivanjem energije potrebne za rekombinaciju para elektron–šupljina i energije eksitacione rekombinacije.
- Fotojonizacijom eksitona kada nastaju slobodni nosioci. Ovaj eksperiment zahteva visoku koncentraciju eksitona.

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

## 5.2 Frenkelovi eksitoni

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 atomski prelaz na 9.99 eV, a i u kristalnom stanju odgovarajući prelaz je približno jednak i iznosi 10.17 eV. Energetski gep 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 eksitona 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  $l$ . Medjutim, funkcije  $\phi$  koje opisuju jedan pobudjen 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:

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

gde je  $\epsilon$  – eksitaciona energija slobodnog atoma,  $|X|$  - interakcija koja meri udeo transfera pobudjenja od  $j$ -tog 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  $\psi_k$ :

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

Sredjivanjem desne strane sledi:

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

tako da se dobijaju svojstvena energetska stanja kao:

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

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 oštre, 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 cepa 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,  
*Nauka*, 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*, Moskva 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 elektronike*, 33-37 (1999).
10. C.Kittel:  
QUANTUM THEORY OF SOLIDS,  
*Wiley*, New York 1963.

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:  
*Lidija Vukosavljević, br.dos. 316/93*  
AU
- Mentor:  
*Dr Jovan Šetrajić,*  
*redovni profesor, PMF, Novi Sad*  
MN
- Naslov rada:  
*Eksitonska stanja u*  
*monomolekulskim 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, eksitoni,*  
*Grinove funkcije, spektri*  
PO
- Čuva se:  
*Biblioteka Instituta za fiziku,*  
*PMF Novi Sad*
- Izvod:  
*U radu je primenjen 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 poredje-*  
*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:  
*25.09.2003.*  
DO
- Članovi komisije:  
- Predsednik:  
*Dr Radomir Kobilarov,*  
*red. profesor, PMF, Novi Sad*  
- Članovi:  
*Dr Jovan Šetrajić,*  
*red. profesor, PMF, Novi Sad*  
*Dr Milica Pavkov,*  
*docent, PMF, Novi Sad*  
KO

UNIVERSITY OF NOVI SAD  
FACULTY OF SCIENCES  
KEY WORDS DOCUMENTATION

- Accension number:  
ANO
- Identification number:  
INO
- Document type:  
*Monograph type*  
DT
- Type of record:  
*Printed text*  
TR
- Contents Code:  
*Diploma work*  
CC
- Author:  
*Lidija Vukosavljević*  
AU
- Mentor:  
*Prof. Dr Jovan Šetrajić*  
MN
- Title:  
*Exciton States in  
Monomolecular 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 simple 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:  
*25.09.2003.*  
DE
- Work defend board:
  - DB President:  
*Dr. Radomir Kobilarov,  
Full Professor, Faculty of Sciences,  
University of Novi Sad*
  - Member:  
*Dr. Jovan Šetrajić,  
Full Professor, Faculty of Sciences,  
University of Novi Sad  
Dr. Milica Pavkov,  
Assistant Professor, Faculty of Sciences,  
University of Novi Sad*