

UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET
INSTITUT ZA FIZIKU

UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET

ПРИЈАЉЕНО	- 4 MAJ 2005
ОРГАНИЗАЦИЈА	БРОЈ
0603	9/170

- DIPLOMSKI RAD -

MOGUĆA EKSITONSKA STANJA
BIMOLEKULSKIH KRISTALNIH FILMOVA

MENTOR

PROF. DR JOVAN ŠETRAJČIĆ

KANDIDAT

JASMINA RODIĆ

NOVI SAD, 2005. 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, 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 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 složenom kristalnom rešetkom.

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

Novi Sad, 20.04.2005.

Jasmina Rodić

Sadržaj

1	Uvod	4
2	Eksitoni u kristalu sa podrešetkom	5
2.1	Grinove funkcije sistema	5
2.2	Zakon disperzije bimolekulskog kristala	8
3	Eksitoni u bimolekulskim filmovima	10
3.1	Model bimolekulskog filma	10
3.2	Zakon disperzije eksitona	11
3.3	Prostorna raspodela eksitonskih stanja	16
4	Zaključak	19
5	Dodatak: Eksitoni u molekulskim kristalima	20
5.1	Eksitoni u kristalima	20
5.2	Frenkelovi eksitoni	22
6	Literatura	24

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 filmova¹, 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 funkcija², koji se danas veoma često koristi u kvantnoj teoriji čvrstog stanja. Zahvaljujući ugrađenoj 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 funkcija³.

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.

¹Filmovi predstavljaju beskonačne strukture u svim kristalnim ravnima paralelnim dvema graničnim površinama, koje su normalne na jedan prioritetan pravac, duž koga je posmatrani sistem ograničen.

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

³Realni delovi polova Grinovih funkcija definišu energije elementarnih ekscitacija (pobudjenja) koje se javljaju u sistemu (odakle se dobija njihov zakon disperzije), dok su imaginarni delovi proporcionalni 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 molekuskog 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 matricni elementi eksitonskog transfera sa čvora \vec{n} na čvor \vec{m} .

2.1 Grinove funkcije sistema

Svojstva posmatranog eksitonskog sistema analiziraćemo pomoću komutatorske pauli-nske 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:

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

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:

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

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

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

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

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:

- prvi član

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

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

- drugi član

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

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

gde \mathcal{N}_0 predstavlja koncentraciju eksitona:

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

- treći član

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

- 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 ($\mathcal{T}_{\bar{a}\bar{b}\bar{c}}$) 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:

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

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 bimolekulskog kristala

Pod pojmom bimolekulski 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 (ω, \vec{k}) prostoru) definišu energije elementarnih ekscitacija u posmatranom sistemu. Kako se rešenja gornjeg sistema jednačina mogu napisati kao $\frac{D^{a/b}}{D}$, 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:

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

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

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

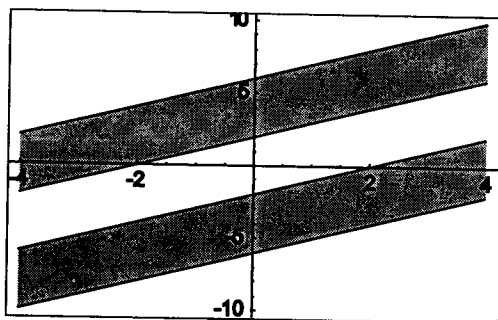
čija su rešenja:

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

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 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 χ . 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. ⁴

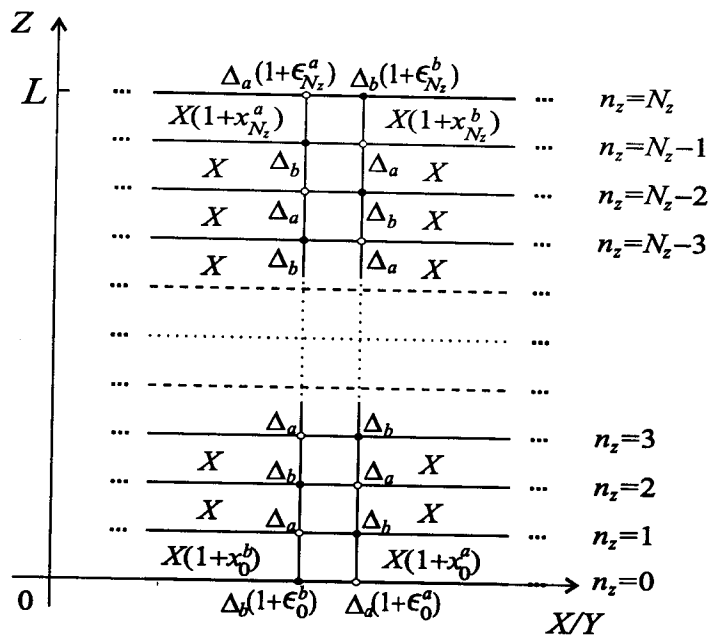
⁴Numerički proračuni i njihovo grafičko prikazivanje su pokazali da se ove dve zone sužavaju bilo povećanjem ili smanjenjem parametra χ u odnosu na $\chi = 1$. Ovo je i očekivano, jer su molekuli proizvoljnim redosledom obeležavani sa a i b . Pored toga, povećanjem ovog parametra celi spektar se pomera 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 primenjujući izloženi pristup, ovde ćemo odrediti iste karakteristike ovih pobudjenja, ali u ultratankim („nano”) kristalnim film-strukturama.

3.1 Model bimolekulskog 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, primesa 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 poseduje 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 Δ_a predstavlja energiju eksitona lokalizovanog na čvoru vrste a – beli krugovi, dok je Δ_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 između susjednih čvorova koji se nalaze u graničnim 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 $n_z = N_z$:

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

(veliĉine ϵ su perturbacioni parametri eksitonske energije u čvorovima graniĉnih površi), a perturbacija energije transfera eksitona u slojevima izmeĉju graniĉnih 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 graniĉne 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 odredjuju poloŹaj molekula u svakom sloju mogu imati proizvoljne celobrojne vrednosti (praktiĉno, od $-\infty$, do $+\infty$).

Zbog prostorne ograniĉenosti filma u z -pravcu koristi se delimiĉna prostorna Furije-transformacija (vremenska Furije-transformacija je veĉ izvršena i odgovarajuĉi izrazi su napisani u aproksimaciji najbliŹih 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 delimiĉne Furije-transformacije jednaĉine (2.22) i (2.23), radi kraĉeg pisanja oznaĉimo $G_{n_z m_z}^{a,b}(k_x, k_y, \omega) \equiv G_{n_z m_z}^{a,b}$. Na taj naĉin se dobijaju dva sistema jednaĉina 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 molekula (duž z -pravca) kada on poĉinje sa molekulom 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 poĉinje molekulom vrste b . Pored toga vaŹi 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:

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

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

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

Zbog konciznijeg zapisa uvode se sledeće oznake:

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

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

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

a drugi set je:

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

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 (3.10) i (3.11) može se izraziti u konciznoj formi:

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

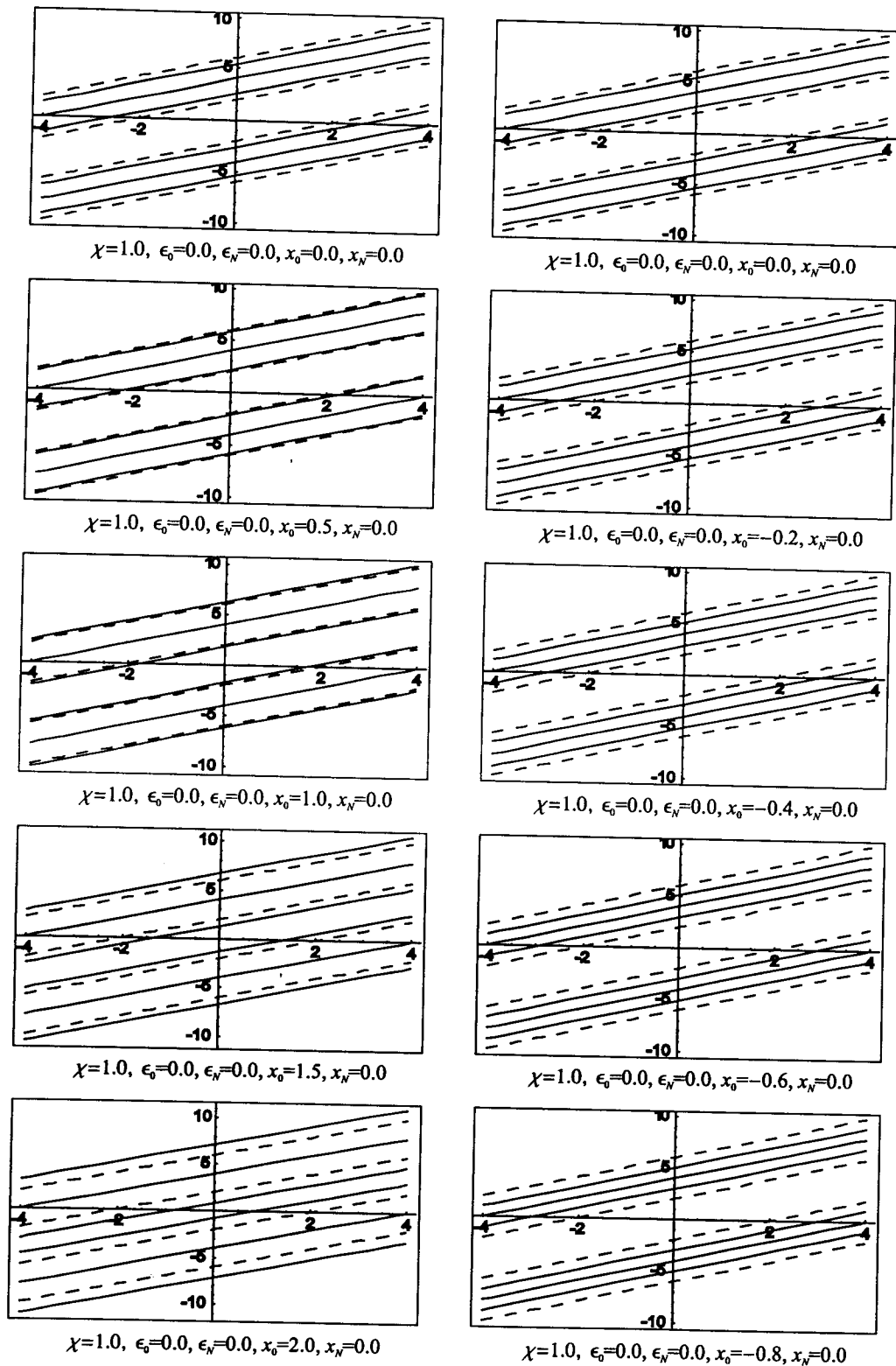
pri čemu je: $\hat{R}_{N_z+1} = -R \cdot \hat{I}_{N_z+1}$, dok \hat{I}_{N_z+1} predstavlja jediničnu matricu, a:

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

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

Karakteristični grafici za „jako” perturbovan film uradjeni su programskim paketom *Mathematica 4.0* i prikazani na slikama 3.2. Kao u balkovskom slučaju i ovde ćemo, da bi bilo jednostavnije, 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) $\mathcal{E}_\nu^* = \frac{\Delta_a - \hbar\omega}{|X|} \equiv \varrho_\nu$; $\nu = 1, 2, 3 \dots, N_z + 1$; 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 energetske nivoi eksitona u perturbovanom filmu! Uočljivo je da se može javiti jedno ili dva lokalizovana stanja u svakoj energetskej 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



Na slici 3.2 prikazane su redukovane energije eksitona šestoslojnog bimolekulskog filma (punim linijama) u zavisnosti od dvodimenzione funkcije pri čemu se menja energetska perturbacija x energije transfera eksitona (medjumolekulska interakcija) između graničnih i njima susednih ravni ($n_z = 0$ i $n_z = 1$, tj. $n_z = N_z$ i $n_z = N_z - 1$): $X_{0,N_z} = (1 + x_{0,N_z})X$. Pošto je promena ovih spektara izmenom parametra x_0 ista kao i izmenom x_{N_z} 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.

3.3 Prostorna raspodela eksitonskih stanja

U cilju analize prostorne raspodele eksitona, tj. verovatnoća nalaženja eksitona sa određenim energijama na pojedinim slojevima bimolekulskog kristalnog filma izračunaćemo spektralne težine pojedinih Grinovih funkcija. Grinove funkcije su multipolne i u imeniocu se nalazi polinom $\mathcal{D}_{2(N+1)}$, dakle, reda $2(N+1)$. Stoga se može izvršiti njegoa faktorizacija na proste polove:

$$G_{n_z, n_z}^{a,b} = -\frac{i\hbar}{2\pi|X|} \sum_{\nu=1}^{N+1} \frac{g_{n_z, n_z}^{a,b}(\varrho_\nu)}{\varrho - \varrho_\nu}. \quad (3.13)$$

Spektralne težine⁵ $g_{n_z, n_z}^{a,b}(\varrho_\nu) \equiv g_{n_z}^{a,b}(\nu)$ se sada mogu izraziti preko:

$$g_{n_z}^{a,b}(\nu) = \frac{D_{n_z}^{a,b}(\varrho_\nu)}{\left. \frac{d}{d\varrho} \mathcal{D}_{2(N+1)}(\varrho) \right|_{\varrho=\varrho_\nu}}, \quad (3.14)$$

gde su $D_{n_z}^{a,b}(\varrho_\nu)$ odgovarajući kofaktori determinante sistema, tj. odgovarajući elementi inverzne matrice pomnoženi determinantom sistema.

⁵Verovatnoće nalaženja eksitona sa određenim energijama po slojevima kristalnog filma su zapravo prostorna distribucija verovatnoće pojavljivanja određenih energetskih stanja eksitona.

U sledećim tabelama su predstavljene vrednosti redukovanih energija i njima odgovarajućih spektralnih funkcija (prostorna raspodela verovatnoća) troslojni film ($N = 2$), tj. sa šest podslojeva. U slučaju perturbovanog filma, spektralne težine za date eksitonske energije se mogu naći samo numeričkim metodama. Rezultati dobijeni za razne vrednosti perturbovanih parametara ϵ filma dati su u tabelama 3.1 i 3.2 (pri čemu je $k_x = k_y = 0$).

Redukovana relativna ENERGIJA	$\chi = 1.0; \epsilon_0 = 0.0; \epsilon_N = 0.0; x_0 = 0.0; x_N = 0.0$					
	1. sloj-a	2. sloj-a	3. sloj-a	1. sloj-b	2. sloj-b	3. sloj-b
-5.41421	0.12507	0.25014	0.12507	0.12507	0.25014	0.12507
-4.00000	0.25000	0.00000	0.25000	0.25000	0.00000	0.25000
-2.58759	0.12478	0.24957	0.12478	0.12478	0.24957	0.12478
2.58759	0.12478	0.24957	0.12478	0.12478	0.24957	0.12478
4.00000	0.25000	0.00000	0.25000	0.25000	0.00000	0.25000
5.41421	0.12507	0.25014	0.12507	0.12507	0.25014	0.12507

Tabela 3.1: Verovatnoće nalaženja eksitona u idealnom šestoslojnom filmu

Tabela 3.1 daje prostornu distribuciju verovatnoća javljanja eksitonskih energija u idealnom bimolekulskom filmu, jer su svi energetski perturbacioni parametri jednaki nuli.

Iz ove tabele se uočava da se na svakom čvoru kristalnog sloja nalazi tačno jedan eksiton, koji može biti u $2(N+1) = 6$ različitih energetskih stanja, sa različitim verovatnoćama nalaženja. Za jednu određenu energiju i sve podslojeve filma ukupna verovatnoća je jednaka jedinici. Isto tako je zbir svih parcijalnih verovatnoća za jedan sloj po svim energijama jednak jedinici. Ovo se može zapisati u sledećem obliku:

$$\sum_{n_z=0}^N \sum_{j=a,b} g_{n_z}^j(\nu) = 1; \quad \sum_{\nu=1}^{N+1} \sum_{j=a,b} g_{n_z}^j(\nu) = 1. \quad (3.15)$$

U tabelama 3.2 prikazane su prostorne verovatnoće nalaženja eksitona u troslojnom bimolekulskom filmu (sa šest podslojeva), ali sada za slučaj kada se menjaju samo parametri x_0 ili x_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 podslojevima filma) za te energije, takodje su prikazani podebljanim brojevima. Pri vrednostima parametra x_0 ili x_N većim od 50 % javljaju se po dva lokalizovana eksitonska stanja sa najvećim verovatnoćama nalaženja eksitona koje su „približno” ravnomerno rasporedjene izmedju graničnih podslojeva (prvog ili poslednjeg) i njima susjednih podslojeva (drugog ili predzadnjeg).

Povećanjem parametra x raste verovatnoća nalaženja eksitona na graničnim i prvim unutrašnjim podslojevima tankog bimolekulskog filma, tako da je pri dovoljno velikim vrednostima parametra x_0 (odnosno x_N) gotovo sigurno da će se eksiton naći na prvim ili drugim (odnosno na predzadnjim ili zadnjim) podslojevima.

Za negativne vrednosti lokalizovana stanja se ne pojavljuju i verovatnoće ovih stanja nisu prikazane.

Redukovana relativna ENERGIJA	$\chi = 1; \epsilon_0 = 0.0; \epsilon_N = 0.0; x_0 = 1.0; x_N = 0.0$					
	1. sloj-a	2. sloj-a	3. sloj-a	1. sloj-b	2. sloj-b	3. sloj-b
-6.23607	0.20003	0.24997	0.05003	0.20003	0.24997	0.05003
-4.00000	0.10000	0.00000	0.40000	0.10000	0.00000	0.40000
-1.76393	0.19978	0.25019	0.04979	0.19978	0.25019	0.04979
1.76393	0.19978	0.25019	0.04979	0.19978	0.25019	0.04979
4.00000	0.10000	0.00000	0.40000	0.10000	0.00000	0.40000
6.23607	0.20003	0.24997	0.05003	0.20003	0.24997	0.05003

Redukovana relativna ENERGIJA	$\chi = 1; \epsilon_0 = 0.0; \epsilon_N = 0.0; x_0 = 2.0; x_N = 0.0$					
	1. sloj-a	2. sloj-a	3. sloj-a	1. sloj-b	2. sloj-b	3. sloj-b
-7.16228	0.22499	0.25001	0.02502	0.22499	0.25001	0.02502
-4.00000	0.05000	0.00000	0.45000	0.05000	0.00000	0.45000
-0.83772	0.22516	0.24984	0.02467	0.22516	0.24984	0.02467
0.83772	0.22516	0.24984	0.02467	0.22516	0.24984	0.02467
4.00000	0.05000	0.00000	0.45000	0.05000	0.00000	0.45000
7.16228	0.22499	0.25001	0.02502	0.22499	0.25001	0.02502

Tabela 3.2: Verovatnoće nalaženja eksitona u perturbovanom bimolekulskom filmu

Iz svih tabela se može uočiti da se na svakom čvoru kristalnog podsloja nalazi tačno jedan eksiton, koji može biti u $2(N + 1) = 6$ različitih energetske stanja, sa različitim verovatnoćama nalaženja. Za proizvoljan broj podslojeva filma $2(N + 1)$ važi sledeća relacija, koja ukazuje na to da je zbir svih verovatnoća nalaženja eksitona jednak broju mogućih stanja:

$$\sum_{\nu=1}^{N+1} \sum_{n_z=0}^N \sum_{j=a,b} g_{n_z}^j(\nu) = 2(N + 1). \quad (3.16)$$

4 Zaključak

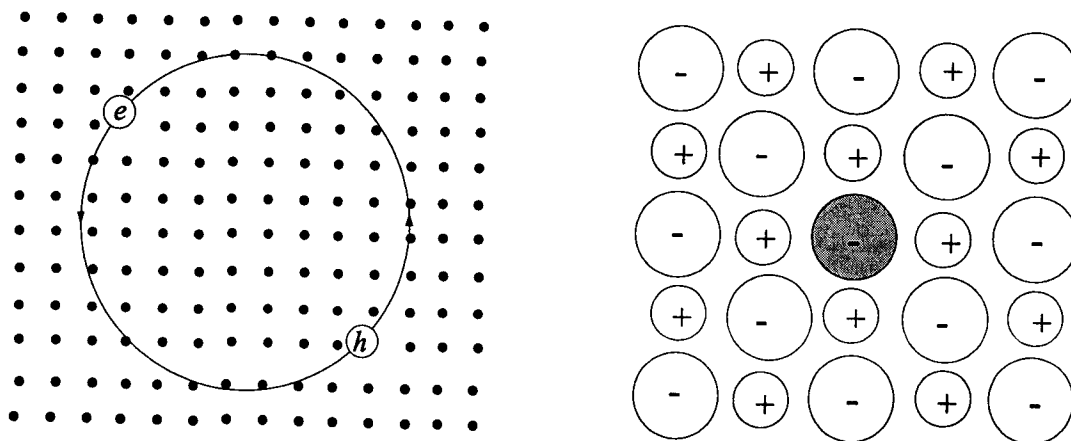
U radu su istraženi i analizirani energetske spektri (moguća energetska stanja) eksitona u dielektričnim, kristalnim, idealnim beskonačnim i film-strukturama, sa složenom kubnom rešetkom, na osnovu čega se došlo do sledećih važnijih rezultata.

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 vrednosti energije transfera eksitona između 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. Ukoliko se pojave lokalizovana eksitonska stanja, onda su ona raspoređena duž graničnih kristalografskih ravni („površinska” stanja). Verovatnoća za pojavu „zaprinskih” stanja, u tom slučaju, je zanemarivo mala.

5 Dodatak: Eksitoni u molekulskim kristalima

5.1 Eksitoni u kristalima

Apsorpcioni i refleksijski spektri često pokazuju strukturu za fotonsku energiju ispod energetske 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 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

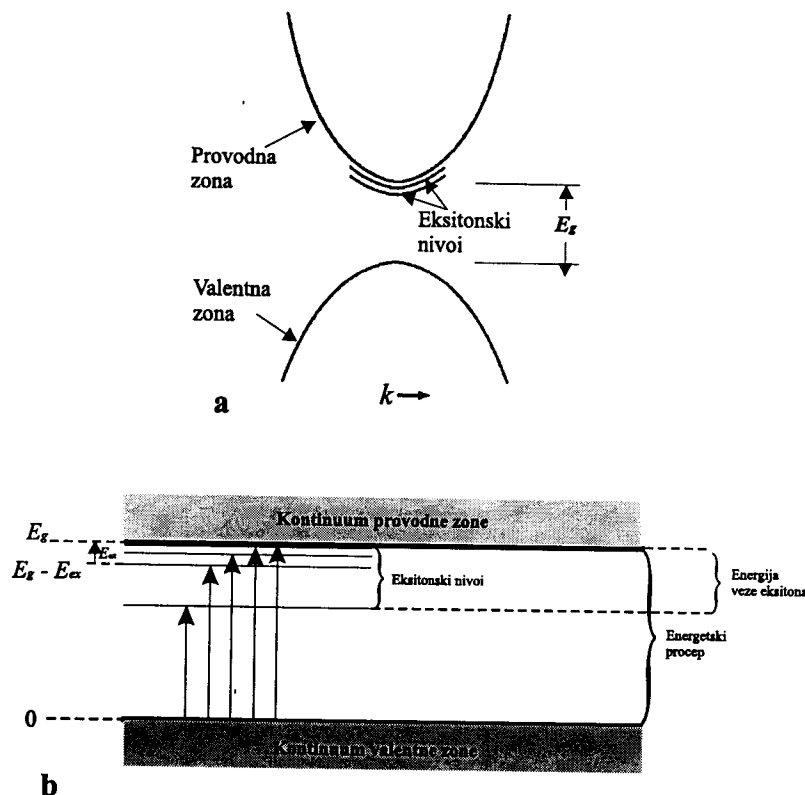
Eksiton se može kretati kroz kristal i prenositi energiju, ali eksiton ne prenosi naelektrisanje jer je električno neutralan. On je sličan pozitronijumu koji je sastavljen od elektrona i pozitrona. Eksiton može biti formiran u svakom izolatoru. Svi eksitoni su nestabilni i imaju relativno malo vreme 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 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 energetske gepa 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 energetske procepu između 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 između 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 između elektrona i šupljine velika u poredjenju sa konstantom rešetke. U realnosti se javljaju mešana eksitonska stanja, ali da li će sistem biti Frenkelov (kristal molekuskog tipa) ili Vanije-Motov (kristal poluprovodničkog tipa), pre svega 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:

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

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

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

Ova funkcija ima istu energiju kao i funkcija ϕ_l koja opisuje bilo koji drugi pobudjeni atom l . Medjutim, funkcije ϕ 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 ϵ – ekscitaciona 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 ψ_k :

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

Sredjivanjem desne strane sledi:

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

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 višelinijaska struktura u kristalu nego u molekulu, zbog Davidovljevog cepanja. Davidov je pokazao da ako postoji σ molekula sa nedegenerisanim nivoima u elementarnoj ćeliji, svaka zona se cepa na σ 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, Moskwa 1979.
9. I.D.Vragović, S.M.Vučenović, J.P.Šetrajić,
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.

Kratka biografija autora



Rodjena 31.07.1972. u Vršcu. Završila osnovnu školu u Plandištu, a zatim gimnaziju "Jovan Jovanović Zmaj" u Novom Sadu. Prirodno-matematički fakultet, odsek za fiziku, smer profesor fizike upisala 1991. godine.

Novi Sad, 21.04.2005.

Jasmina Rodić

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:
Jasmina Rodić, br.dos. 715/91
AU
- Mentor:
Dr Jovan Šetrajčić,
redovni profesor, PMF, Novi Sad
MN
- Naslov rada:
Moguća eksitonskih stanja
bimolekulskih kristalnih filmova
NR
- Jezik publikacije:
Srpski (latinica)
JP
- Jezik izvoda:
Srpski
JI
- Zemlja publikovanja:
Srbija
ZP
- Uže geografsko područje:
Vojvodina
UGP
- Godina:
2005.
GO
- Izdavač:
Autorski reprint
IZ
- Mesto i adresa:
Prirodno-matematički fakultet,
Trg Dositeja Obradovića 4, 21000 Novi Sad
MA
- Fizički opis rada:
(6/27/10/2/6/12/2)
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:
.03.2005.
DP
- Datum odbrane:
.05.2005.
DO
- Članovi komisije:
- Predsednik:
Dr Radomir Kobilarov,
red. 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:
Jasmina Rodić
AU
- Mentor:
Prof. Dr Jovan Šetrajić
MN
- Title:
*Possible Exciton States
of 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:
2005.
PY
- Publisher:
Author's reprint
PU
- Publ.place:
*Novi Sad,
Department of Physics,
Faculty of Sciences,
Trg Dositeja Obradovića 4*
PP
- Physical description:
(6/27/10/2/6/12/2)
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:
.03.2005.
ASB
- Defended:
.05.2005.
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*

