



UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET
DEPARTMAN ZA FIZIKU



**DISKRETIZACIJA OPTIČKIH OSOBINA
ULTRATANKIH MOLEKULSKIH FILMOVA**

-diplomski rad-

Mentor:
Dr Jovan Šetrajčić

Kandidat:
Jovan Stančević

Novi Sad, 2012.

Predgovor

Nauka je u današnje vreme veoma zainteresovana za niskodimenzione sisteme, dimenzija reda nekoliko nanometara, koji u praktičnoj primeni pokazuju svoje izuzetne karakteristike na raznim poljima. Najdominantniji doprinosi mogu se prepoznati u sledećim disciplinama: nanoelektronika, optoelektronika, visoko temperaturna superprovodnost, nanomehanika, nanomedicina, energetika, telekomunikacija, računarske tehnike, magnetne tehnike, senzorska tehnika itd.

Najodgovornije „čestice“ za mikroskopske i makroskopske osobine niskodimenzionih sistema su eksiton. Eksiton je par elektron–šupljina, povezan privlačnom Kulonovom interakcijom, slično kao proton–elektron u atomu vodonika.

Zahvalnost za prepoznavanje značaja ove teme, kao i rukovođenje tokom izrade ovoga rada dugujem prof. dr Jovanu Šetrajčiću.

Novi Sad, 26. 6. 2012.

Jovan Stančević

SADRŽAJ

1. UVOD	4
1.1. MOLEKULSKI KRISTALI	6
1.2. EKSITONI	7
1.3 FRENKELOVI EKSITONI	9
2. EKSITONI U MOLEKULSKIM KRISTALIMA	10
2.1. GRINOVE FUNKCIJE SISTEMA	10
2.2. ZAKON DISPERZIJE	13
2.3. PERMITIVNOST I OPTIČKE OSOBINE	14
3. EKSITONI U TANKIM KRISTALnim FILMOVIMA	19
3.1. MODEL MOLEKULSKOG FILMA	19
3.2. ZAKON DISPERZIJE	22
3.3. PERMITIVNOST I OPTIČKE OSOBINE	23
3. ZAKLJUČAK	27
4. LITERATURA	29

1 Uvod

Niskodimenzioni kvantni sistemi su sistemi sa slojevitom strukturom, reda veličine nekoliko atomskih slojeva, pa je zbog toga opravdano izučavanje upravo slojevitih struktura, tj. tankih filmova ili sličnih struktura niskih dimenzija.

Izučavanje slojevitih struktura nas usmerava ka razumevanju kinematičkih i dinamičkih zakonitosti po kojima se vladaju elektroni, šupljine, eksitonii, fononi, pa nam se nameće cilj konstrukcije matematičkog modela koji bi tretirao ponašanje navedenih čestica/kvazičestica.

Broj nanopatenata iznosi nekoliko hiljada i fokusirani su na 5 sledećih fundamentalnih nanomaterijala: nanoslojevi (ultratanki filmovi), kvantne žice, ugljenikove nanotačke, fulereni, dentrimeri.

Predmet ovog diplomskog rada jeste da se prezentuje način na koji se ponašaju niskodimenzione strukture, ultratanki dielektrični filmovi, ako se nađu u spoljašnjem elektromagnetnom polju.

Istraživanja u vezi sa navedenom problematikom bazirana su na molekulskim kristalima koji su elektroneprovodni (dielektrici ili izolatori), i vode nas ka pronađenju vrednosti dielektrične permitivnosti koja je u direktnoj korelaciji sa optičkim karakteristikama (indeksima prelamanja i apsorpcije).

Za razliku od masivnih (balk) kristalnih struktura kod ultratankih filmova, sačinjenih od iste vrste materijala, očekuju se izrazito kvantni efekti.

Ono što nas posebno zanima to je pitanje kako će ultratanke strukture reagovati na donju površ / supstrat (mesto na kom je posmatrani film nanesen nekom od metoda naparavanja), kao i pitanje ponašanja filma sa gornje površi. Navedena pitanja nagoveštavaju odgovore gde će se primetiti korelacija između veoma malih dimenzija i granica ovih sistema i kvantnih efekata koji se javljaju u njima na makroskopskom nivou.

Direktna veza između dimenzija materijala i uticaja graničnih uslova na njihove optičke veličine otvara nove ideje o iskoristivosti ovih materijala, bilo kao nano filteri ili svojevrsni optički ultrafini senzori.

Jedni od naglašenijih zadataka istraživanja jesu dielektrične i optičke osobine ultratankoslojnih molekulskih kristala u okviru modela eksitona Frenkelovog tipa. Eksitonski podsistem je interesantan zbog činjenice da su upravo eksitonii odgovorni za

dielektrična, optička (apsorpcija, disperzija svetlosti, luminescencija), fotoelektrična i druga svojstva kristala.

Posebnost niskodimenzionih struktura je u tome što prisustvo graničnih površi i pojava specijalnih perturbacionih uslova na tim granicama dovode do izmenjenih osobina ovih materijala i specifičnih pojava u odnosu na iste karakteristike odgovarajućih masivnih uzoraka.

U vezi sa svim navedenim, u ovom radu biće istraženo i analizirano sledeće:

- uticaj prisustva granica ultratanke kristalne film-strukture na optičke osobine ovih dielektričnih filmova, tako što će se odrediti dielektrična permitivnost, indeks prelamanja i apsorpcije;
- dobijeni rezultati uporediće se sa rezultatima za idealne, neograničene (*balk*) uzorke iste kristalne građe, pri čemu će se potražiti najbitnije razlike ova dva sistema;
- pokušaće da se protumače uzroci promena fundamentalnih fizičkih karakteristika ovih kvantnih struktura.

Navedene analize biće vršene korišćenjem metode Grinovih funkcija¹ koja se i danas često koristi u kvantnoj teoriji čvrstog stanja. Ovo naročito stoga što ova metoda svoje adekvatno ugrađene statistike uspešno koristi za tumačenje mikroskopskih i makroskopskih svojstava kristala (ravnotežnih, neravnotežnih).

Strukturu rada sačinjavaju sledeći postupci:

- (a) na početku rada je data teorija optičkih pobuđenja u molekulskim kristalima i formiran efektivni bozonski hamiltonian u harmonijskoj i aproksimaciji najbližih suseda;
- (b) metodom Grinovih funkcija definisan je zakon disperzije;
- (c) linearnim odzivom na perturbaciju sistema spoljašnjim elektromagnetskim poljem nađena je dinamička permitivnost;
- (d) pomoću Kramers-Kronigovih i Maksvelovih relacija određene su dve osnovne optičke karakteristike – dinamički indeks prelamanja i dinamički indeks apsorpcije.

¹ Metoda Grinovih funkcija pogodna je zbog definicije svojih polova:

(a) realni deo pola definisane energiju elementarnih ekscitacija (pobuđenja) koje se javljaju u sistemu (odakle se dobija njihov zakon disperzije);
(b) imaginarni deo je proporcionalan recipročnoj vrednosti vremena života tih ekscitacija.

1.1. MOLEKULSKI KRISTALI

Nama interesanti molekulski kristali su sistemi molekula unutar kojih su definisane kompletne interakcije atoma/molekula sa gledišta klasičnih hemijskih sila.

Interakcije delimo u tri vrste:

- (1) Prema Kesomu (V. H. Kessom) – moguće je da kod molekulskih kristala može doći do interakcije i električno neutralnih molekula, ako su im centri nanelektrisanja razdvojeni. Oni tada poseduju permanentne dipole i sa klasičnog aspekta, ako se urede na odgovarajući način, snizice ukupnu energiju sistema. To se postiže: (a) zauzimanjem istog pravca usaglašeno orijentisanih dipola; (b) paralelnim rasporedom suprotno orijentisanih dipola.

$$\text{Energija te interakcije iznosi: } W = -\frac{2}{3} \left(\frac{p^4}{kT} \right) \frac{1}{r^6},$$

p – srednji dipolni moment

k – Boltmanova const

T – temperatura

r – rastojanje između centara dipola

Ovaj pristup izuzetno nam je značajan jer molekuli uglavnom predstavljaju permanentne dipole.

- (2) Prema Debaju (P. I. W. Debye) potrebno je uzeti u obzir i slučajeve kada se javlja indukovana polarizacija. Konstituenti koji nisu dipoli pod uticajem dela koji je polarizovan transformišu se u dipole, što povratno pojačava polarizaciju inicijalnog dela tako da induktivni efekat može dostići značajne razmere.

$$\text{Energija te interakcije je: } W = -4\alpha \frac{p^2}{r^6},$$

α – koeficijent polarizabilnosti

- (3) Prema Londonu (F. London) energetska interakcija se uspostavlja na osnovu usklađivanja elektronskih gustina u blizini dodira atoma. Nema preklapanja orbitala ali se prepostavlja da se u prostoru interakcije vrši deformacija elektronskog oblaka tako da naizmenično jedan i drugi atom sinhrono smanjuju tj. povećavaju gustinu. Dinamička interakcija sa rezultujućim srednjim dipolnim momentom jednaka je nuli.

$$\text{Energija ove interakcije ima oblik: } W = -\frac{3}{2} \frac{\alpha_1 \alpha_2 I_1 I_2}{(I_1 + I_2) r^6},$$

I_1, I_2 – ionizacioni potencijali za dva posmatrana molekula

Jedinjenja koja mogu obrazovati molekulske kristale jesu sledeća:

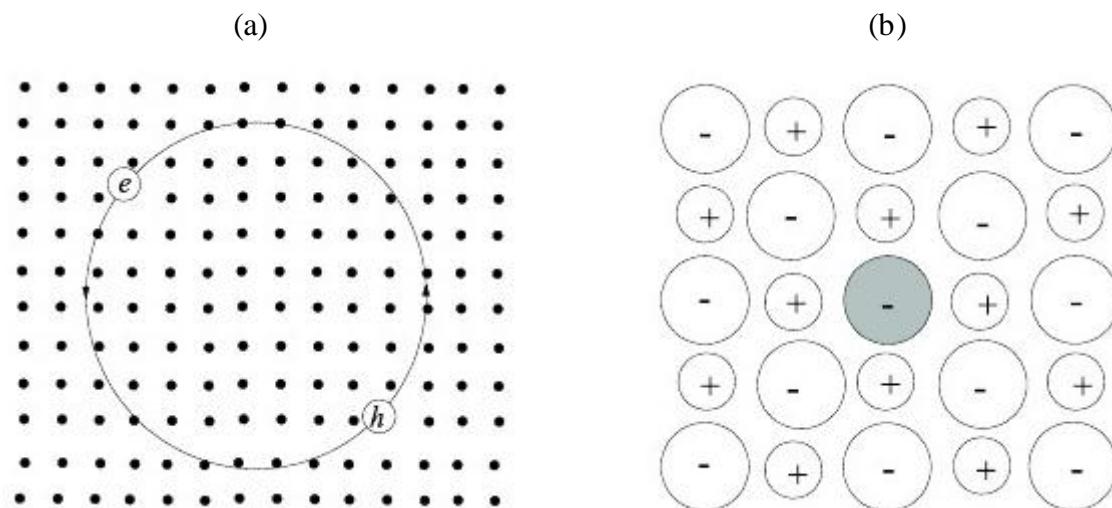
- (a) kristali inertnih gasova: Ne, Ar, Kr, Xe (sa FCC struktrom);
- (b) kristali H₂, N₂, O₂;
- (c) kristali F₂, C₁₂, Br₂, I₂.

Molekulske kristale karakterišu sledeće fizičke osobine: to su električni izolatori, imaju nisku topotnu provodnost, nisku tačku topljenja i ključanja, meki su, relativno lako stišljivi i transparentni za fotone energija do duboko u UV oblasti. Kristalna rešetka im se obrazuje po geometrijskom pakovanju.

1.2. EKSITONI

Apsorpcioni i refleksioni spektri pokazuju strukturu za fotonsku energiju ispod energetskog gepa, gde se inače očekuje da kristal bude transparentan. Ovakva struktura je prouzrokovana apsorpcijom fotona i kreacijom para elektron-šupljina.

Elektron i šupljina su vezani privlačnom Kulonovom interakcijom, slično kao elektron i proton kod atoma vodonika. Ovaj par elektron-šupljina naziva se **eksiton** i on se tretira dvojako, tj. eksitonski modeli se predstavljaju na sledeća dva načina(slika1.1):



Slika 1.1: Dva tipa eksitonu: (a)Vanje Motov eksiton (b)Frenkelov eksiton

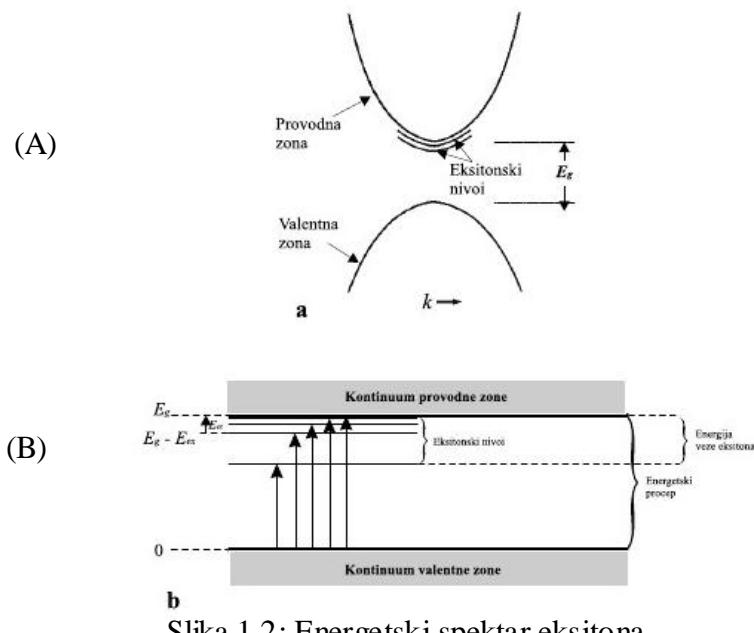
- (a) Eksiton Vanje–Mota su slabo vezani, a udaljenost elektron–šupljina je velika u poređenju sa konstantom rešetke.
- (b) Frenkelovi eksitonu su malog radiusa i čvrsto su vezani. Jedan idealan Frenkelov eksiton prolaziće kroz ceo kristal kao talas, ali elektron će uvek biti u nepostrednoj blizini šupljine.

Eksiton se može kretati kroz kristal i prenosi energiju, ali on ne prenosi nanelektrisanje jer je električno neutralan. Može se formirati u svakom izolatoru i graditi komplekse – bieksitone (kreacija dva eksitona).

Kada je vezani geopol indirektni, eksiton u blizini direktnog geopola mogu biti nestabilni pa se raspadaju na slobodan elektron i slobodnu šupljinu. Svi eksitonii su nestabilni sa vremenom života 10^{-8} s – singletni, 10^{-3} s – tripletni. Prag za proces prelaza u slobodni elektron i šupljinu je za energiju fotona $\hbar\omega > E_g$ u direktnom procesu, a indirektnom za energiju fonona $\hbar\Omega > E_g$.

Energija veze, koja smanjuje prag, je reda 1 meV za Vanje–Motov, a 1 eV za Frenkelov eksiton.

Prelazi u kojima se formiraju eksitonii ispod energetskog geopola prikazani su na slikama(1.2): (A) eksitonski nivoi u odnosu na granicu provodne zone i (B) energetski nivoi eksitona sa centrom masa u mirovanju.



Slika 1.2: Energetski spektar eksitona

(A): Eksiton može imati translacionu kinetičku energiju koja, ako je veća od energije veze, tada je eksiton metastabilan u odnosu na raspadanje na slobodne konstituente. Svi eksitonii su potencijalno nestabilni u odnosu na emisivnu rekombinaciju, kod koje elektron „upada” u stanje šupljine u valentnoj zoni, što je propraćeno emisijom fotona ili fonona.

(B): Optički prelazi sa vrha valentne zone prikazani su strelicama, najduža odgovara ionizaciji eksitona, pa prema tome i energetskom procepu. Postoji kontinualan skup nivoa pridruženih svakom od prikazanih eksitonskih nivoa, pošto centar masa može posedovati translacionu kinetičku energiju (svaki eksitonski nivo obrazuje jednu eksitonsku zonu).

Energija veze eksitona može se meriti na tri načina:

- (1) u optičkom prelazu iz valentne zone – iz razlike između energije potrebne za kreaciju eksitona i energije kreacije slobodnog elektrona i slobodne šupljine;
- (2) iz luminescencije pri rekombinaciji – upoređivanjem energije potrebne za rekombinaciju para elektron – šupljina i energije eksitacione rekombinacije;
- (3) fotoionizacijom elektrona kada nastaju slobodni nosioci.

1.3. FRENKELOVI EKSITONI

Stanja Frenkelovih eksitona imaju oblik progresivnog talasa, kao i sva ostala pobuđenja 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: $\Psi_k = u_1 u_2 \cdots u_{N-1} u_N$, ukoliko su interakcije između atoma zanemarene.

Ukoliko je jedan atom j u pobuđenom stanju v_j , sistem se opisuje kao:

$\Phi_j = u_1 u_2 \cdots u_{j-1} v_j u_{j+1} \cdots u_N$. Ova funkcija ima istu energiju kao i funkcija Φ_l koja opisuje bilo koji drugi pobuđeni atom l . Međutim, funkcije Φ koje opisuju jedan pobuđen atom i $N-1$ atoma u njegovom okruženju, koji su u osnovnom stanju, nisu stacionarna kvantna stanja. Ako postoji bilo kakva interakcija između pobuđenog atoma i susednih atoma u osnovnom stanju, energija pobuđenja će se prenositi od atoma do atoma, a svojstvena stanja će tada imati talasnu formu. Kada hamiltonijan sistema deluje na funkciju sa j -tim pobuđenim atomom, dobija se:

$$H\Phi_j = \varepsilon \Phi_j + X(\Phi_{j-1} + \Phi_{j+1})$$

gde je ε – eksitaciona energija slobodnog atoma, X – interakcija koja meri udeo transfera pobuđenja od j -toga atoma do njegovih najbližih suseda $j-1$ i $j+1$. Rešenja prethodne jednačine su talasi Blohovog oblika:

$$\Psi_k = \sum_j e^{ijk} \Phi_j ;$$

ako pustimo da operator H deluje na Ψ_k :

$$H\Psi_k = \sum_j e^{ijk} H\Phi_j = \sum_j e^{ijk} [\varepsilon \Phi_j + X(\Phi_{j-1} + \Phi_{j+1})] = (\varepsilon + 2|X|\cos ka)\Psi_k ;$$

te su svojstvene vrednosti energetskih stanja: $E_k = \varepsilon + 2|X|\cos ka$.

$$k = \frac{2\pi s}{Na}$$

dovoljene vrednosti talasnog vektora k

(dobijene primenom periodičnih uslova)

$$s = -\frac{1}{2}N, -\frac{1}{2}N+1, \dots, -\frac{1}{2}N-1.$$

2. EKSITONI U MOLEKULSKIM KRISTALIMA

Posmatramo pobuđenja idealnog beskonačnog kubnog molekulskog kristala, u kojem kvant svetlosti prebacuje elektrone iz osnovnog u pobuđeno stanje. Prelaz elektrona rezultira rađanje kvanta pobuđenja, odnosno eksitona, te stoga postavljamo model standardnog eksitonskog hamiltonijana, koji u konfiguracionom prostoru dobija sledeći oblik:

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

gde su: $\hat{P}_{\vec{n}}^+$ i $\hat{P}_{\vec{n}}^-$ operatori kreacije i anihilacije eksitona na čvoru \vec{n} kristalne rešetke,

$\Delta_{\vec{n}}$ energija eksitona lokalizovanog na čvoru \vec{n} ,

$X_{\vec{n}\vec{m}}$ i $Y_{\vec{n}\vec{m}}$ matrični elementi eksitonskog transfera sa čvora \vec{n} na čvor \vec{m} .

2.1. GRINOVE FUNKCIJE SISTEMA

Svojstva posmatranog eksitonskog sistema analiziramo pomoću komutatorske paulionske Grinove funkcije :

$$\Gamma_{\vec{n}\vec{m}}(t) = \langle \langle \hat{P}_{\vec{n}}(t) | \hat{P}_{\vec{m}}^+(0) \rangle \rangle = \Theta(t) \langle \hat{P}_{\vec{n}}(t), \hat{P}_{\vec{m}}^+(0) \rangle, \quad (2.2)$$

koja zadovoljava jednačinu kretanja:

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

Korišćenjem komutatorskih relacija za Pauli operatore:

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

jednačina kretanja dobija jednostavniji oblik :

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

gde je :

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

Pokazaćemo postupak izračunavanja gornjih veličina za, naprimjer, $i=2$ (ostale članove sume dobijamo analognim postupkom):

$$K_2(\vec{n}) = \left[\hat{P}_{\vec{n}}(t), \sum_{\vec{k}\vec{l}} X_{\vec{k}\vec{l}} \hat{P}_{\vec{k}}^+ \hat{P}_{\vec{l}} \right] = \sum_{\vec{k}\vec{l}} X_{\vec{k}\vec{l}} [\hat{P}_{\vec{n}}, \hat{P}_{\vec{k}}^+] \hat{P}_{\vec{l}} = \sum_{\vec{k}\vec{l}} X_{\vec{k}\vec{l}} (1 - 2\hat{P}_{\vec{n}}^+ \hat{P}_{\vec{n}}) \delta_{\vec{n}\vec{k}} \hat{P}_{\vec{l}} = \sum_{\vec{i}} X_{\vec{n}\vec{l}} (1 - 2\hat{P}_{\vec{n}}^+ \hat{P}_{\vec{n}}) \hat{P}_{\vec{l}}$$

te odatle računamo:

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

gde je: $T_{\vec{n}\vec{l}\vec{m}}(t) = \langle \langle \hat{P}_{\vec{n}}^+(t) \hat{P}_{\vec{i}}(t) \hat{P}_{\vec{l}}(t) \hat{P}_{\vec{m}}^+(0) \rangle \rangle$ Paulionska Grinova funkcija višeg reda.

Zamenom izračunatih veličina u (2.5) konačno dobijamo jednačinu kretanja za paulionsku Grinovu funkciju:

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

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

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

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

$$\hat{P} \approx \hat{B} - \hat{B}^+ \hat{B} \hat{B} ; \quad \hat{P}^+ \approx \hat{B}^+ - \hat{B}^+ \hat{B}^+ \hat{B} ; \quad \hat{P}^+ \hat{P} \approx \hat{B}^+ \hat{B} - \hat{B}^+ \hat{B}^+ \hat{B} \hat{B} \quad (2.9)$$

tako da dobijamo:

$$\Gamma_{\vec{n}\vec{m}}(t) = \langle \langle \hat{P}_{\vec{n}}(t) \hat{P}_{\vec{m}}^+(0) \rangle \rangle = \langle \langle \hat{B}_{\vec{n}}(t) \hat{B}_{\vec{m}}^+(0) \rangle \rangle - \langle \langle \hat{B}_{\vec{n}}(t) \hat{B}_{\vec{m}}^+(0) \hat{B}_{\vec{m}}^+(0) \hat{B}_{\vec{n}}(0) \rangle \rangle -$$

$$-\langle \langle \hat{B}_n^+(t) \hat{B}_n^-(t) \hat{B}_m^+(t) | \hat{B}_m^+(0) \rangle \rangle + \langle \langle \hat{B}_n^+(t) \hat{B}_n^-(t) \hat{B}_m^+(t) | \hat{B}_m^+(0) \hat{B}_m^+(0) \hat{B}_m^-(0) \rangle \rangle \quad (2.10)$$

Dekuplovanjem (2.7) viših Grinovih funkcija, i pomoću poznatih Boze-komutacionih relacija:

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

članovi u (2.10) sada postaju:

- I član $\langle \langle \hat{B}_n^-(t) | \hat{B}_m^+(0) \rangle \rangle = G_{nm}^-(t)$ (2.12)

$G_{nm}^-(t)$ je retardovana Grinova funkcija

- II član $\langle \langle \hat{B}_n^-(t) | \hat{B}_m^+(0) \hat{B}_m^+(0) \hat{B}_m^-(0) \rangle \rangle = \Theta(t) \langle [\hat{B}_n^-, \hat{B}_m^+ \hat{B}_m^+ \hat{B}_m^-] \rangle = \Theta(t) (\langle [\delta_{nm} + \hat{B}_m^+ \hat{B}_n^-] \hat{B}_m^+ \hat{B}_m^- \rangle - \langle \hat{B}_m^+ \hat{B}_m^+ \hat{B}_m^- \hat{B}_n^- \rangle) = 2G_{nm}^-(t)\eta_0$ (2.13)

gde je η_0 koncentracija eksitona:

$$\eta_0 = \langle \hat{B}^+ \hat{B} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} (e^{\hbar\omega_0(\vec{k})/g} - 1)^{-1} \quad (2.14)$$

- III član $\langle \langle \hat{B}_n^+(t) \hat{B}_n^-(t) \hat{B}_n^-(t) | \hat{B}_m^+(0) \rangle \rangle = 2G_{nm}^-(t)\eta_0$ (2.15)

• IV član

$$\langle \langle \hat{B}_n^+(t) \hat{B}_n^-(t) \hat{B}_n^-(t) | \hat{B}_m^+(0) \hat{B}_m^+(0) \hat{B}_m^-(0) \rangle \rangle = 2\mathfrak{R}_{nm}^-(t)G_{nm}^2(t), \quad (2.16)$$

gde je $\mathfrak{R}_{nm}^-(t) = \langle \langle \hat{B}_n^+(t) | \hat{B}_m^-(0) \rangle \rangle$. (2.17)

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

$$\Gamma_{nm}^-(t) = (1 - 4\eta_0)G_{nm}^-(t) + 2\mathfrak{R}_{nm}^-(t)G_{nm}^2(t) + O(\eta^2). \quad (2.18)$$

Za paulionske Grinove funkcije višeg reda (T_{aabc}) , na levoj strani Grinove funkcije se prosto izvrši samo zamena Pauli operatora sa Boze operatorima, a na desnoj strani izvršimo aproksimaciju (2.9), i dobijemo:

$$\begin{aligned} T_{aabc} &= \langle \langle \hat{P}_a^+(t) \hat{P}_a^-(t) \hat{P}_b^-(t) | \hat{P}_c^+(0) \rangle \rangle = \langle \langle \hat{B}_a^+(t) \hat{B}_a^-(t) \hat{B}_b^-(t) | \hat{B}_c^+(0) \rangle \rangle - \\ &- \langle \langle \hat{B}_a^+(t) \hat{B}_a^-(t) \hat{B}_b^-(t) | \hat{B}_c^+(0) \hat{B}_c^+(0) \hat{B}_c^-(0) \rangle \rangle = \\ &= \eta_0 G_{bc}^-(t) + \eta_{ba}^- G_{ac}^-(t) - 2\mathfrak{R}_{ac}^-(t) G_{bc}^-(t) G_{ac}^-(t) + O(\eta_0^2). \end{aligned} \quad (2.19)$$

Izraze za $\Gamma_{nm}^-, T_{nnlm}, T_{llnm}$ koji su izraženi preko bozonskih Grinovih funkcija, ubacimo u jednačinu kretanja za paulionsku Grinovu funkciju 2.7:

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{d}{dt} [(1 - 4\eta_0)G_{\vec{n}\vec{m}}(t) + 2\mathfrak{R}_{\vec{n}\vec{m}}(t)G_{\vec{n}\vec{m}}^2(t)] &= i\hbar\delta(t)\delta_{\vec{n}\vec{m}}(1 - 2\langle \hat{P}_{\vec{n}}^+ \hat{P}_{\vec{n}} \rangle) + \\
 + \Delta_{\vec{n}}[(1 - 4\eta_0)G_{\vec{n}\vec{m}}(t) + 2\mathfrak{R}_{\vec{n}\vec{m}}(t)G_{\vec{n}\vec{m}}^2(t)] + \sum_l X_{\vec{n}\vec{l}}[(1 - 4\eta_0)G_{\vec{l}\vec{m}}(t) + 2\mathfrak{R}_{\vec{l}\vec{m}}(t)G_{\vec{l}\vec{m}}^2(t)] - \\
 - 2\sum_l X_{\vec{n}\vec{l}}[\eta_0 G_{\vec{l}\vec{m}}(t) + \eta_{\vec{l}\vec{n}}(t)G_{\vec{n}\vec{m}}(t) - 2\mathfrak{R}_{\vec{n}\vec{m}}(t)G_{\vec{l}\vec{m}}(t)G_{\vec{n}\vec{m}}(t)] + \\
 + 2\sum_l Y_{\vec{n}\vec{l}}[\eta_0 G_{\vec{n}\vec{m}}(t) + \eta_{\vec{n}\vec{l}}G_{\vec{l}\vec{m}}(t) - 2\mathfrak{R}_{\vec{l}\vec{m}}(t)G_{\vec{n}\vec{m}}(t)G_{\vec{l}\vec{m}}(t)] . \tag{2.20}
 \end{aligned}$$

Prethodnu jednačinu rešavamo u najnižoj aproksimaciji:

$$\eta_0 \approx 0 ; \quad \eta_{\vec{a}\vec{b}} \approx 0 ; \quad \hat{P} \approx \hat{B} ; \quad \hat{P}^+ \approx \hat{B}^+ ; \quad \hat{P}^+ \hat{P} \approx \hat{B}^+ \hat{B} ;$$

$$\text{takođe je: } \langle \hat{P}_{\vec{n}}^+ \hat{P}_{\vec{n}} \rangle \approx \langle \hat{B}_{\vec{n}}^+ \hat{B}_{\vec{n}} \rangle = \eta_0 \approx 0 ,$$

$$\text{i proizvodi Grinovih funkcija: } G \cdot G \approx 0 ; \quad G \cdot \mathfrak{R} \approx 0 ,$$

pa je dekuplovana jednačina tada :

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

2.2. ZAKON DISPERZIJE

Ako se izvrše vremenski Furije-transformacije tipa:

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

dobijamo:

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

Korišćenjem aproksimacije najbližih suseda $\vec{l} \rightarrow \vec{n} \pm \vec{\lambda}_l ; \vec{n} \pm \vec{\lambda}_1 = n_x \pm 1, n_y, n_z ;$

$\vec{n} \pm \vec{\lambda}_2 = n_x, n_y \pm 1, n_z ; \quad \vec{n} \pm \vec{\lambda}_3 = n_x, n_y, n_z \pm 1$ jednačina (2.23) tada će preći u :

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

Za neograničen kristal koristimo potpunu prostornu Furije-transformaciju:

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

i uzimajući u obzir da je za idealnu kubnu strukturu energija eksitona na svakom čvoru ista, kao i transfer energije među susedima: $\Delta_{\vec{a}} \equiv \Delta$; $X_{\vec{a}, a \pm \vec{\lambda}_i} \equiv X_i$; $i \in \{x, y, z\}$;

pa će jednačina (2.24) preći u :

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

Sređivanjem (2.26) dobijamo:

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

možemo sada izraziti Grinovu funkciju:

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

odakle nalazimo energiju eksitona izračunavanjem realnog dela pola:

$$E_{\vec{k}}(\omega) \equiv \hbar\omega = \Delta + 2[X_x \cos a_x k_x + X_y \cos a_y k_y + X_z \cos a_z k_z]. \tag{2.29}$$

Jednačina (2.29) predstavlja poznati zakon disperzije eksitona u molekulskim kristalima.

2.3. PERMITIVNOST I OPTIČKE OSOBINE

A) DIELEKTRIČNA PERMITIVNOST

Dielektrična permitivnost je data izrazom:

$$\varepsilon_{\vec{k}}^{-1}(\omega) = 1 - 2\pi i S [\Gamma(\omega) + \Gamma(-\omega)] \quad , \quad (2.30)$$

gde je $S = \frac{\tau_0 E_0^2}{8\pi\hbar}$ (strukturni faktor).

U nultoj aproksimaciji paulionske Grinove funkcije prelaze u bozonske, pa imamo:

$$\varepsilon_{\vec{k}}^{-1}(\omega) = 1 - 2\pi i S [G(\omega) + G(-\omega)] \quad . \quad (2.31)$$

Ako u (2.28) stavimo $a_x = a_y = a_z \equiv a$, dobijamo :

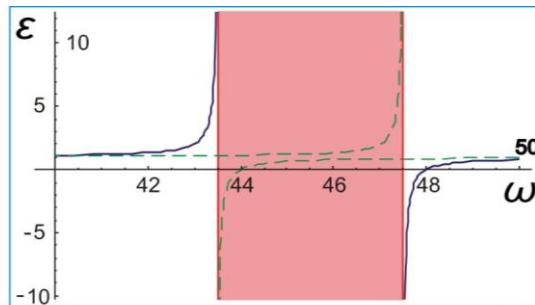
$$G_{\vec{k}}(\omega) = \frac{i\hbar}{2\pi} \frac{1}{\hbar\omega - E_{\vec{k}}} \quad , \quad (2.32)$$

$$\text{gde je: } E_{\vec{k}} = \Delta - 2|X|(\cos ak_x + \cos ak_y + \cos ak_z) \quad . \quad (2.33)$$

Zamenom (2.32) sa (2.33) u (2.31) dobijamo dinamičku permitivnost molekulskog kristala:

$$\varepsilon_{\vec{k}}(\omega) = \left[1 + 2\hbar S \frac{E_{\vec{k}}}{(\hbar\omega)^2 - E_{\vec{k}}^2} \right]^{-1} \quad . \quad (2.34)$$

Zavisnost permitivnosti od redukovane frekvencije spoljašnjeg elektromagnetskog polja ($\hbar\omega/\Delta$) se može predstaviti grafički(slika 2.1) :



Slika 2.1: Permitivnost molekulskog kristala

Vidljivo je postojanje jedne apsorpcione zone unutar određenih graničnih frekvencija.Ova energetska zona je računata za dvodimenzionalni centar Briluenove zone ($k_x = k_y = 0; k_z = [0, \pi]$). Za sve ostale energije kristal je transparentan.²

B) OPTIČKE OSOBINE

Za optički izotropnu sredinu u statičkom ili sporo promenljivom elektromagnetskom polju, vektor električne indukcije je oblika: $\vec{D} = \epsilon \vec{E} + 4\pi \vec{P}$,

² Za prostorno ograničene sisteme, npr. filmove, nastaje narušenje izotropije, te kristalni film pokazuje različite optičke osobine na različitim slojevima.

uz pretpostavku o lokalnosti i sinhronosti između $\vec{D}(\vec{r}, t)$ i $\vec{E}(\vec{r}, t)$;

gde je: \vec{E} vektor usrednjene jačine električnog polja u dатој sredini

\vec{P} vektor polarizacije

ϵ dielektrična propustljivost (permitivnost) date sredine.

U brzo promenljivom³ elektromagnetskom polju narušava se sinhronost, dok je pitanje šta je sa uslovom lokalnosti uzajamnog dejstva između \vec{D} i \vec{E} .

Prepostavljamo da je veza između \vec{D} i \vec{E} linear, i da je frekvencija elektromagnetskog polja toliko velika da je vrednost $\vec{D}(t)$ određena ne samo vrednošću $\vec{E}(t)$ u istom vremenskom trenutku, nego i vrednostima $\vec{E}(t')$ u prethodnim trenucima ($-\infty < t' \leq t$):

$$\vec{D}(t) = \vec{E}(t) + \int_{-\infty}^t f(t-t') \vec{E}(t') dt' = \vec{E}(t) + \int_{-\infty}^{+\infty} f(t-t') \vec{E}(t') dt' , \quad (2.36)$$

Prepostavljajući da je $f(t-t')=0$ za $t'>t$ i prelaskom na Furije-reprezentaciju funkcija:

$$\vec{D}(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \vec{D}(\omega) e^{-i\omega t} d\omega; \vec{E}(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} f(\omega) e^{-i\omega t} d\omega; f(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} f(\omega) e^{-i\omega t} d\omega \quad (2.37)$$

uz odgovarajuće inverzne Furije transforme:

$$\vec{D}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} \vec{D}(t) e^{i\omega t} dt; \vec{E}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} \vec{E}(t) e^{i\omega t} dt ; f(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) e^{i\omega t} dt ; \quad (2.38)$$

ako iskoristimo definiciju delta-funkcije: $\delta(\omega - \omega') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) e^{i\omega t} dt$, dobijamo (uz

zamenu (2.38.) u (2.37.)):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \{\vec{D}(\omega) - [1 + f(\omega)] \vec{E}(\omega)\} e^{-i\omega t} d\omega = 0 . \quad (2.39)$$

Kako ovaj integral mora biti nula za svako t , onda je: $\vec{D}(\omega) = \epsilon(\omega) \vec{E}(\omega)$,

$$\text{gde je: } \epsilon(\omega) = 1 + f(\omega) \equiv 1 + \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) e^{i\omega t} dt . \quad (2.41)$$

Iz (2.41) se vidi da je veza \vec{D} i \vec{E} identična za slučaj stacionarnog i slučaj brzo promenljivog elektromagnetskog polja.

³ Brzo promenljivo elektromagnetsko polje je polje čija je frekvencija veća od frekvencije uspostavljanja polarizacije date sredine ($\omega > \omega_p$).

Pod frekventnom disperzijom dielektrične propustljivosti, odnosno permitivnosti (ϵ), podrazumeva se njena zavisnost od frekvencije (ω), tj. $\epsilon=\epsilon(\omega)$. S obzirom na činjenicu da je $f(t)$ realna funkcija, iz (2.41) zaključujemo da je dielektrična propustljivost kompleksna veličina, pa je možemo napisati:

$$\epsilon(\omega)=\epsilon'(\omega)+i\epsilon''(\omega), \text{ gde je: } \epsilon'(\omega) \text{ njen realni deo, a } \epsilon''(\omega) \text{ imaginarni deo.} \quad (2.42)$$

Pri promeni znaka ω : $(\omega \rightarrow -\omega)$, $\epsilon(\omega)$ prelazi u:

$$\begin{aligned} \epsilon(-\omega) &= \epsilon'(-\omega) + i\epsilon''(-\omega) = \epsilon'(\omega) - i\epsilon''(\omega) \equiv \epsilon^*(\omega) \\ \Rightarrow \epsilon'(-\omega) &= \epsilon'(\omega); \epsilon''(-\omega) = -\epsilon''(\omega) \end{aligned} \quad (2.43)$$

primećujemo da je: $\epsilon'(\omega)$ parna funkcija od ω , a $\epsilon''(\omega)$ neparna funkcija od ω .

Zbog toga se između $\epsilon'(\omega)$ i $\epsilon''(\omega)$ mogu postaviti relacije:

$$\begin{aligned} \epsilon'(\omega)-1 &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\epsilon''(\omega)}{x-\omega} dx = \frac{2}{\pi} \int_0^{+\infty} \frac{x\epsilon''(\omega)}{x^2-\omega^2} dx ; \\ \epsilon''(\omega) &= -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\epsilon'(\omega)-1}{x-\omega} dx = \frac{2\omega}{\pi} \int_0^{+\infty} \frac{\epsilon'(\omega)}{x^2-\omega^2} dx , \end{aligned} \quad (2.44)$$

koje se nazivaju disperzione ili Kramers-Kronigove relacije, koje se mogu koristiti za obradu eksperimentalnih podataka, jer su $\epsilon'(\omega)$ i $\epsilon''(\omega)$ neposredno povezane sa indeksom prelamanja i indeksom apsorpcije (optičke karakteristike sredine).

Iz disperzionih relacija (2.45) možemo odrediti $\epsilon'(\omega)$ ako znamo zavisnost $\epsilon''(\omega)$ u svim frekventnim opsezima, i obratno. Oblik krive $\epsilon'(\omega)$ u tački ω je određena vrednostima $\epsilon''(x)$ za vrednosti x koje su bliske ω , što dovodi do određenih relacija među krivama $\epsilon'(\omega)$ i $\epsilon''(\omega)$ u blizini ω .

Velicki je pokazao da važi sledeća frekventna korespondencija, koja je potvrđena eksperimentalno:

pik indeksa prelamanja \leftrightarrow apsorpcioni prag;

pad indeksa prelamanja \leftrightarrow apsorpcioni pikk.

Uvodeći kompleksni indeks prelamanja $\eta = n + ik$, i uz izraz (2.42) Maksvel daje vezu između dielektrične konstante sredine i indeksa prelamanja:

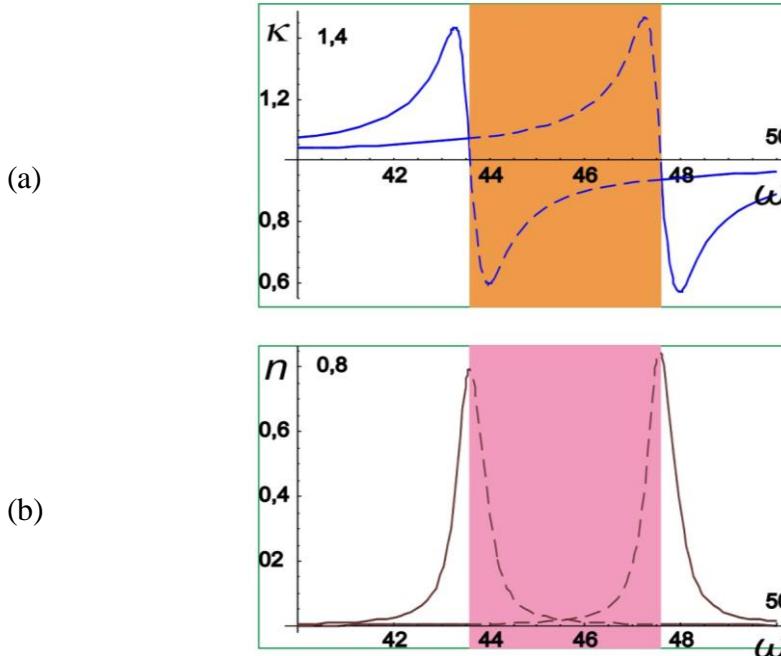
$$\epsilon(\omega) \equiv \epsilon'(\omega) + i\epsilon''(\omega) = \eta^2 \equiv n^2 - k^2 + 2ink . \quad (2.45)$$

Primećujemo da je: $\epsilon'(\omega) = n^2 - k^2$; $\epsilon''(\omega) = 2nk$. (2.46)

Na osnovu toga možemo naći izraze za indekse apsorpcije i prelamanja u sledećoj formi:

$$\kappa \equiv \kappa(\omega) = \sqrt{\frac{\varepsilon'(\omega)}{2} \left\{ \sqrt{1 + \left[\frac{\varepsilon''(\omega)}{\varepsilon'(\omega)} \right]^2} - 1 \right\}} ; n \equiv n(\omega) = \sqrt{\frac{\varepsilon'(\omega)}{2} \left\{ \sqrt{1 + \left[\frac{\varepsilon''(\omega)}{\varepsilon'(\omega)} \right]^2} + 1 \right\}} \quad (2.47)$$

Na slikama (2.2a) i (2.2b) su grafički prikazane zavisnosti $\kappa = \kappa(\omega)$ i $n = n(\omega)$:



Slika 2.2: Grafički prikaz zavisnosti indeksa apsorpcije i prelamanja od frekvencije

Posmatram prostiranje ravnog elektromagnetskog talasa duž x-ose u sredini sa kompleksnom dielektričnom propustljivošću, a u tom slučaju i talasni vektor \vec{k} takođe mora biti kompleksan. Vektor jačine električnog polja talasa je određen sa:

$$\vec{E} = \vec{E}_0 e^{i(kx - \omega t)}, \quad (2.48)$$

koji mora da zadovolji talasnu jednačinu:

$$\nabla^2 \vec{E} = \frac{\epsilon}{c^2} \vec{E}. \quad (2.49)$$

Uzimajući u obzir kompleksnu permitivnost $\epsilon = \epsilon(\omega)$, dobijamo:

$$k^2 = \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \epsilon = \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \eta^2 \Rightarrow k = \frac{\omega}{c} \eta = \frac{\omega}{c} (n + i\kappa), \quad (2.50)$$

uvrštavanjem talasnog vektora u (2.49), dobijamo:

$$\vec{E} = \vec{E}_0 e^{-\frac{\omega}{c} kx} e^{\frac{i\omega}{c_1} (x - c_1 t)}; \quad c_1 \equiv \frac{c}{n} \text{ brzina svetlosti u datoј sredini} \quad (2.51)$$

Iz prethodne jednačine proizilazi da je realni deo kompleksnog indeksa prelamanja (n) obični indeks prelamanja, a imaginarni deo (κ), koji se naziva koeficijent ekstinkcije, opisuje apsorpciju elektromagnetskog polja u datoј sredini.

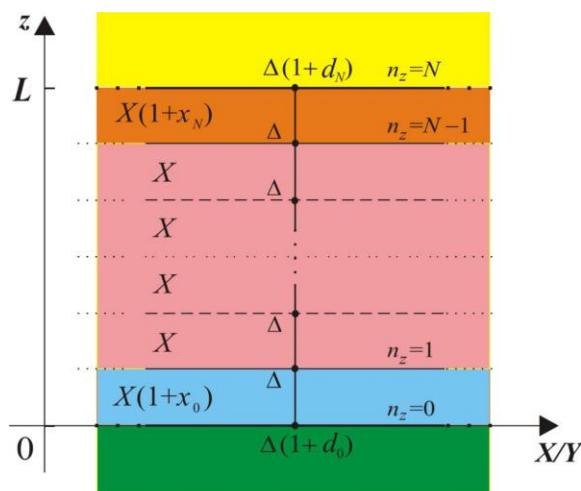
3. EKSITONI U TANKIM KRISTALNIM FILMOVIMA

U prethodnoj glavi su određene, izračunate i grafički predstavljene energije eksitona (zakon disperzije), dielektrična permitivnost i osnovna optička svojstva (indeksi prelamanja i apsorpcije) u neograničenim kristalnim strukturama. Primenjujući isti pristup, ovde ćemo odrediti iste karakterike ovih pobuđenja, 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 supstratu nekim tehnološkim postupkom (napanjavanjem, 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-pravcu ima konačnu debljinu (L). Znači da ovaj film poseduje dve beskonačne granične površi paralelne XY-ravni, i to za $z=0$ i za $z=L$.

3.1. MODEL MOLEKULSKOG FILMA

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



Slika 3.1: Presek modela molekulskog 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:

($n_z = 1; n_z = N - 1$):

$$\begin{aligned}\Delta_n &\equiv \Delta(1 + d_0\delta_{n_z,0} + d_N\delta_{n_z,N}) \\ X_{\vec{n},\vec{n}+\vec{\lambda}_z} &\equiv X_z(1 + x_0\delta_{n_z,0} + x_N\delta_{n_z,N-1}) \\ X_{\vec{n},\vec{n}-\vec{\lambda}_z} &\equiv X_z(1 + x_0\delta_{n_z,1} + x_N\delta_{n_z,N})\end{aligned}\quad (3.1)$$

- parametar d : definiše promenu energije izolovanog molekula na graničnim površima;
- parametar x : definiše 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 uzima vrednosti: $n_z = 0, 1, 2, \dots, N$, gde je $N \in [2, 10]$ kod ultratankih filmova;
- indeksi n_x i n_y koji odrećuju položaj molekula u svakom sloju, mogu imati proizvoljne celobrojne vrednosti (praktično od $-\infty$ do $+\infty$).

Zbog prostorne ograničenosti filma u z -pravcu, koristimo delimičnu prostornu Furije transformaciju:

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

Prilikom delimične Furije transformacije u jednačini (2.24), zbog kraćeg pisanja, pogodno je uvesti oznake: $G_{n_z m_z}(k_x, k_y, \omega) \equiv f_{n_z m_z}$, pa tako dobijamo:

$$\begin{aligned}\hbar\omega \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} e^{ik_x a_x (n_x - m_x)} e^{ik_y a_y (n_y - m_y)} G_{n_z m_z} &= \frac{i\hbar}{2\pi} \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} e^{ik_x a_x (n_x - m_x)} e^{ik_y a_y (n_y - m_y)} \delta_{n_z m_z} + \\ + \Delta(1 + d_0\delta_{n_z,0} + d_N\delta_{n_z,N}) \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} e^{ik_x a_x (n_x - m_x)} e^{ik_y a_y (n_y - m_y)} G_{n_z, m_z} &+ \\ + X_x \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} e^{ik_x a_x (n_x + 1 - m_x)} e^{ik_y a_y (n_y - m_y)} G_{n_z, m_z} X_x \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} e^{ik_x a_x (n_x - 1 - m_x)} e^{ik_y a_y (n_y - m_y)} G_{n_z, m_z} &+\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + X_y \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} e^{ik_x a_x (n_x - m_x)} e^{ik_y a_y (n_y + 1 - m_y)} G_{n_z, m_z} + \\
 & + X_y \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} e^{ik_x a_x (n_x - m_x)} e^{ik_y a_y (n_y - 1 - m_y)} G_{n_z, m_z} + \\
 & + X_z (1 + x_0 \delta_{n_z, 0} + x_N \delta_{n_z, N-1}) \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} e^{ik_x a_x (n_x - m_x)} e^{ik_y a_y (n_y - m_y)} G_{n_z+1, m_z} + \\
 & + X_z (1 + x_0 \delta_{n_z, 1} + x_N \delta_{n_z, N}) \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} e^{ik_x a_x (n_x - m_x)} e^{ik_y a_y (n_y - m_y)} G_{n_z-1, m_z}
 \end{aligned} \tag{3.3}$$

Daljim sređivanjem, imamo:

$$\begin{aligned}
 & G_{n_z m_z} \left[-\frac{\hbar \omega - \Delta - 2(X_x \cos a_x k_x + X_y \cos a_y k_y)}{X_z} + \frac{\Delta}{X_z} (d_0 \delta_{n_z, 0} + d_N \delta_{n_z, N}) \right] + \\
 & + G_{n_z+1, m_z} (1 + x_0 \delta_{n_z, 0} + x_N \delta_{n_z, N-1}) + G_{n_z-1, m_z} (1 + x_0 \delta_{n_z, 1} + x_N \delta_{n_z, N}) = -\frac{i\hbar}{2\pi X_z} \delta_{n_z, m_z}
 \end{aligned} \tag{3.4}$$

Ako stavimo da je $X_x = X_y = X_z \equiv -|X|$ i $a_x = a_y = a_z \equiv a$, onda je:

$$\begin{aligned}
 & G_{n_z m_z} \left[\wp - \frac{\Delta}{|X|} (d_0 \delta_{n_z, 0} + d_N \delta_{n_z, N}) \right] + G_{n_z+1, m_z} (1 + x_0 \delta_{n_z, 0} + x_N \delta_{n_z, N-1}) + \\
 & + G_{n_z-1, m_z} (1 + x_0 \delta_{n_z, 1} + x_N \delta_{n_z, N}) = \frac{i\hbar}{2\pi |X|} \delta_{n_z, m_z}
 \end{aligned} \tag{3.5}$$

sa uvedenom smenom:

$$\wp = \frac{\hbar \omega - \Delta}{|X|} + 2(\cos a k_x + \cos a k_y) . \tag{3.6}$$

Jednačina (3.5) je 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, koje dobijamo kada iste teže beskonačnosti, a to znači da je determinanta sistema:

$$D_{N+1}(\wp) = \begin{vmatrix} \wp + \frac{\Delta}{|\mathbf{X}|} d_0 & 1+x_0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1+x_0 & \wp & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \wp & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \ddots & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & \wp & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & \wp & 1+x_N \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1+x_N & \wp + \frac{\Delta}{|\mathbf{X}|} d_N \end{vmatrix}_{N+1} \quad (3.7)$$

jednaka nuli:

$$D_{N+1} \equiv 0 . \quad (3.8)$$

Uslov (3.8) se rešava za slučaj perturbovanog molekulskog filma sa pet kristalnih ravnih duž z -pravca ($N=4$). Granični parametri će biti menjani u sledećim intervalima:

- $\{d_0, d_N\} \in [-0,2;+0,2]$ – promena energije Δ na graničnim ravnima, do 20% na manje i na više,
- $\{x_0, x_N\} \in [-0,5;+1,0]$ – promena energije transfera X u graničnim slojevima, do 50% naniže i do 100% naviše.

Proračuni su, zbog nemogućnosti nalaženja analitičkog rešenja, rađeni uz pomoć programskog paketa MATHEMATICA 4.0

3.3. PERMITIVNOST I OPTIČKE OSOBINE

Pri određivanju dinamičke permitivnosti molekulskog filma, koristimo formulu u istom obliku koja se koristila za proračun permitivnosti odgovarajućih neograničenih kristalnih struktura, ali stot razlikom što u ovom slučaju permitivnost zavisi od sloja filma n_z :

$$\varepsilon_{n_z}^{-1}(\omega) = 1 - 2\pi S [G_{n_z}(\omega) + G_{n_z}(-\omega)], \quad (3.9)$$

Uvrštavanjem nađenih izraza za Grinove funkcije $G_{n_z} = -\frac{i\hbar}{2\pi|X|} \sum_{\nu=1}^{N+1} \frac{g_{n_z; n_z}(\wp_\nu)}{\wp - \wp_\nu}$,

dobija se:

$$\varepsilon_{n_z}^{-1}(\omega) = 1 - \frac{\hbar S}{|X|} \sum_{\nu=1}^{N+1} \sum_{s=+, -} \frac{g_{n_z}^\nu}{\wp_s - \wp_\nu}, \quad (3.10)$$

gde su: $g_{n_z; n_z}(\wp_\nu) \equiv g_{n_z}^\nu$ spektralne težine⁴, a $\wp_\pm(\omega) = \frac{\mp \hbar \omega - \Delta}{|X|} + 2(\cos a_x k_x + \cos a_y k_y)$.

Obeležavanjem $\frac{\Delta}{|X|} \equiv |p|$ i sređivanjem izraza za permitivnost, dobijamo:

$$\varepsilon_{n_z}(\omega) = \left\{ 1 - \frac{2\hbar S}{|X|} \sum_{\nu=1}^{N+1} g_{n_z}^\nu \frac{\wp_\nu - |p| - 2(\cos a_x k_x + \cos a_y k_y)}{\left(\frac{\hbar \omega}{|X|} \right)^2 - [\wp_\nu - |p| - 2(\cos a_x k_x + \cos a_y k_y)]^2} \right\}^{-1}. \quad (3.11)$$

Na isti način kao i u slučaju balk struktura na osnovu Kramers-Kronigovih (disperzionih) relacija definišu se indeksi apsorpcije i prelamanja:

$$\kappa_{n_z}(\omega) = \sqrt{\frac{\varepsilon_{n_z}(\omega)}{2} \left\{ \sqrt{1 + \left[\frac{\varepsilon_{n_z}''(\omega)}{\varepsilon_{n_z}'(\omega)} \right]^2} - 1 \right\}}; \quad (3.12)$$

⁴ 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 energetskih stanja eksitona.

$$n_{n_z}(\omega) = \sqrt{\frac{\epsilon_{n_z}^*(\omega)}{2} \left\{ \sqrt{1 + \left[\frac{\epsilon_{n_z}''(\omega)}{\epsilon_{n_z}^*(\omega)} \right]^2} + 1 \right\}} \quad (3.13)$$

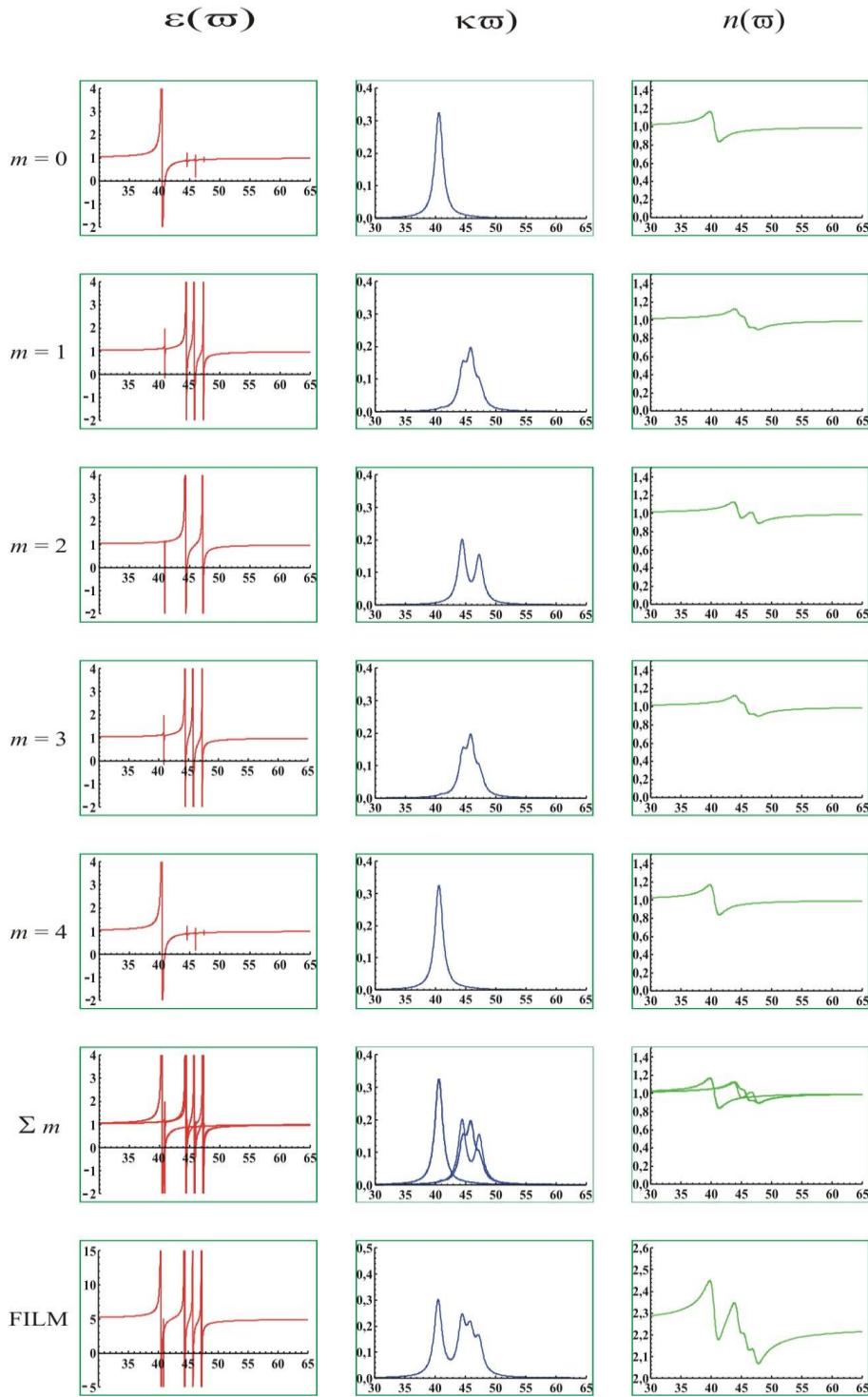
jer je $\epsilon_{n_z}(\omega) = \epsilon_{n_z}^*(\omega) + i\epsilon_{n_z}''(\omega)$.

Za ukupni film (u pravcu normalnom na granične površi, duž z-ose) indeksi se mogu definisati kao:

$$\kappa_F(\omega) = \sum_{n_z} \kappa_{n_z}(\omega) \quad ; \quad n_F(\omega) = \sum_{n_z} n_{n_z}(\omega) \quad . \quad (3.14)$$

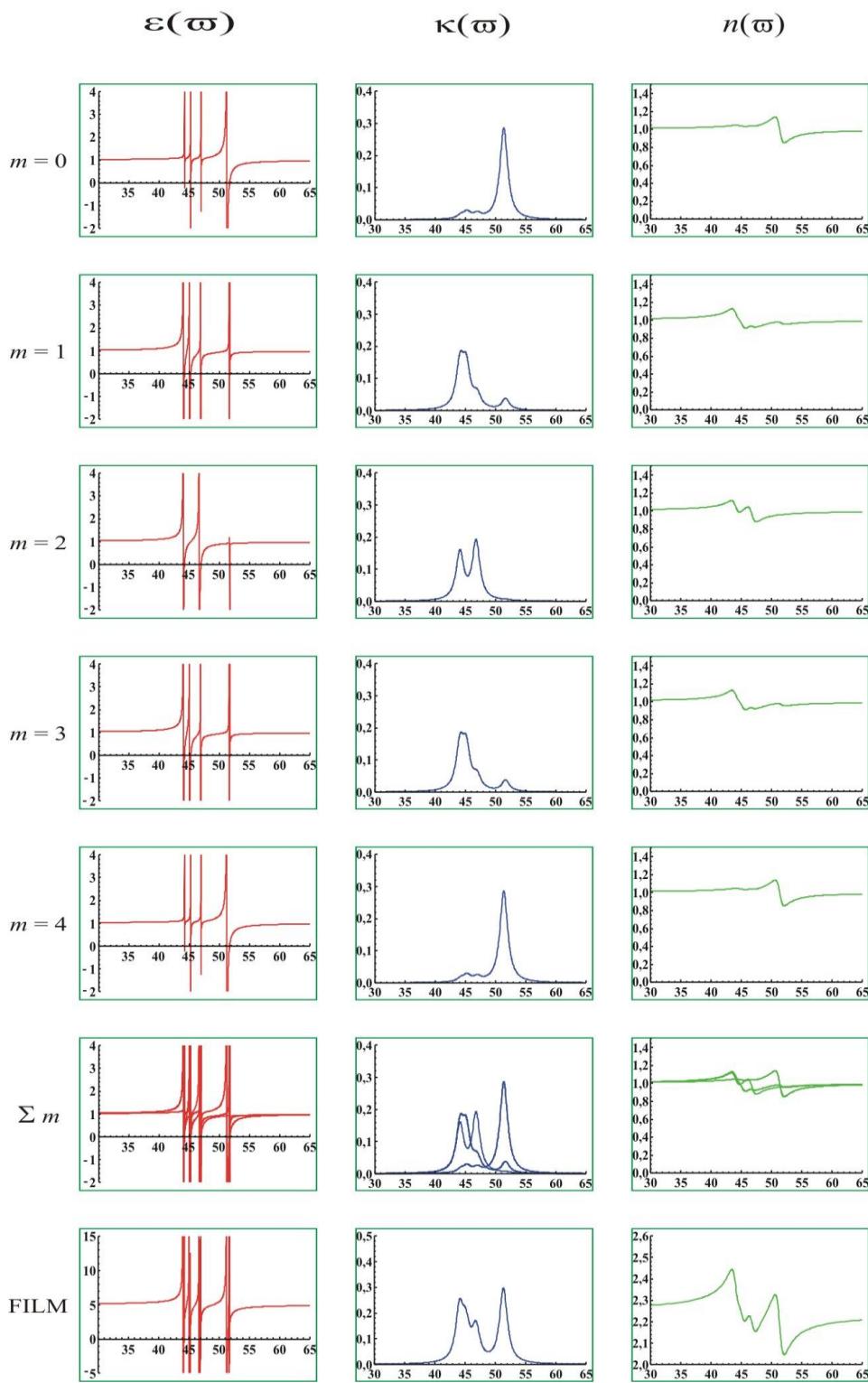
Na slikama 3.2.a i 3.2.b prikazane su zavisnosti relativne dinamičke permitivnosti, indeksa apsorpcije i indeksa prelamanja od redukovane energije spoljašnjeg elektromagnetskog zračenja za petoslojni film. Na svim slikama su date zavisnosti za spoljašnje/granične površi, prve unutrašnje i središnju kristalogravsku ravan, a na kraju i za ceo film.

$$d_0 = -0,1; \quad d_N = -0,1; \quad x_0 = -0,5; \quad x_N = -0,5$$



Slika 3.2.a: Grafički prikaz zavisnosti relativne dinamičke permitivnosti, indeksa apsorpcije i indeksa prelamanja od redukovane frekvencije spoljašnjeg elektromagnetskog polja za $d_0 = -0,1; d_N = -0,1; x_0 = -0,5; x_N = -0,5$

$$d_0 = 0,1; \quad d_N = 0,1; \quad x_0 = 1; \quad x_N = 1$$



Slika 3.2.b: Grafički prikaz zavisnosti relativne dinamičke permitivnosti, indeksa apsorpcije i indeksa prelamanja od redukovane frekvencije spoljašnjeg elektromagnetskog polja za $d_0 = 0,1; d_N = 0,1; x_0 = 1; x_N = 1$

4. ZAKLJUČAK

Iz prikaza tri grupe grafika za različite vrednosti perturbacionih parametara d i x , uočava se pojava rezonantnih pikova,⁵ čiji broj i raspored veoma zavisi od graničnih perturbacionih parametara.

Posmatranjem molekulskog filma na slikama primetna je simetrija po slojevima i to tako da su permitivnost, indeks apsorpcije i indeks prelamanja jednaki za $m=0,4$; $m=1,3$, dok su za srednji $m=2$ drugačiji.

U I koloni je data zavisnost permitivnosti, a u II i III koloni su date zavisnosti indeksa apsorpcije i indeksa prelamanja od redukovane frekvencije spoljašnjeg elektromagnetskog polja za četvoroslojni dielektrični film, kada se parametar Δ menja perturbacijom d_0 (ili d_N).

Na slikama 3.2.a i 3.2.b može se videti da broj rezonantnih pikova u slučaju kada ($\epsilon(\omega_r) \rightarrow \pm \infty$) zavisi od broja, odnosno položaja atomske ravni n_z za koji se računa permitivnost, ali i od vrednosti parametra $d_{0/N}$. Povećanjem tog parametra dolazi do širenja zone apsorpcije, a dominantan rezonantni pik se uočava samo na graničnoj površi filma ($n_z = 0$ ili $n_z \equiv N = 4$). To je i očekivan rezultat, jer se iz analize spektara i spektralnih težina eksitonskih stanja vidi da je verovatnoća nalaženja eksitona u lokalizovanom stanju, najveća baš na tom mestu.

Sa svih prikazanih grafika vidi se da se pitomo povećanje indeksa prelamanja ruši na mestima promene apsorpcionih svojstava (indeksa apsorpcije). Tamo gde indeks apsorpcije raste – indeks prelamanja opada, tamo gde se indeks apsorpcije menja naglije (raste,opada) nalaze se pikovi (singulariteti) indeksa prelamanja. Ovo je u skladu sa predviđanjem Kramerove teorije, samo što se tamo ti efekti javljaju na početku i na kraju apsorpcione zone, a ovde su oni diskretni i ne opisuju širu kontinualnu zonu, već kvantnu i veoma selektivnu uskozonsku promenu.

Rezultati ovih analiza su pokazali bitne razlike u dielektričnom odzivu (makroskopske, ali dimenziono-kvantne osobine) eksitona između neograničenih struktura i simetričnih film-struktura kao isključivu posledicu ograničenosti filma duž z -

⁵ Rezonantni pikovi u frekventnoj zavisnosti dinamičke permitivnosti su položaji rezonantne frekvencije, u kojima permitivnost divergira ($\epsilon \rightarrow \pm \infty$). To su i energije (talasne dužine) onog elektromagnetskog zarađenja koje modelni kristal na datom mestu "proguta", tj. te energije se na tom mestu apsorbuju.

pravca i postojanja perturbacija parametara na graničnim površima i graničnim slojevima strukture.

- Dielektrični odziv filma pokazuje osobinu selektivnosti, tj. pojavu diskretnih rezonantnih apsorpcionih pikova na tačno određenim energijama (što je posledica diskretnih vrednosti z -komponente talasnog vektora eksitona), čiji broj i raspored zavisi od broja slojeva u filmu i perturbacionih parametara.⁶ Ove osobine daju filmovima prednost u odnosu na neograničene strukture (čiji je dielektrični odziv kontinualan u određenom opsegu energija), jer se u tom slučaju filmovi mogu koristiti kao svojevrsni filteri spoljašnjeg zračenja.
- Poredenjem sa rezonantnim linijama permitivnosti, može se uočiti da je broj apsorpcionih pikova manji, tj. postoje dominantne frekvencije koje će stvarno biti apsorbovane.
- Tamo gde indeks apsorpcije raste – indeks prelamanja opada, na mestima promene indeksa apsorpcije nalaze se singulariteti indeksa prelamanja.

⁶ Analize uticaja ovih parametara daju dragocene informacije o prisustvu i uticaju tzv. dimenzionog kvantovanja.

5. LITERATURA

1. V. M. Agranovich:
TEORIJA 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. C. Kittel:
QUANTUM THEORY OF SOLIDS,
Wiley, New York 1963.
10. D. Petrović i S. Lukić
EKSPERIMENTALNA FIZIKA KONDENZOVANE MATERIJE,
UNS, Novi Sad 2000.
11. S.S. Pelemiš
Optičke osobine nano-kristalnih dielektričnih film- struktura,
Dr disertacija, *PMF*, Novi Sad 2010.
12. S.S. Pelemiš, D.Rodić, A.J. Šetračić-Tomić, J.P. Setračić i D.Lj. Mirjanić
OPTIČKE KARAKTERISTIKE SIMETRIČNOG
ULTRATANKOG MOLEKULSKOG NANOFILMA,
Međunarodna konferencija Savremeni Materijali 2012, Banja Luka 2012.

BIOGRAFIJA

Rođen 2. 1. 1974. u Žablju, gde je završio srednju školu "22. Oktobar", smer Saradnik u prirodnim naukama. Prirodno-matematički fakultet u Novom Sadu, smer Diplomirani fizičar, upisao je 1996. godine.



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:
Jovan Stančević, br. dos. 503/87
AU
- Mentor:
Dr Jovan Setrajić,
redovni profesor, PMF, Novi Sad
MN
- Naslov rada:
Diskretizacija optičkih osobina
ultratankih molekulskih filmova
NR
- Jezik publikacije:
Srpski (latinica)
JP
- Jezik izvoda:
Srpski
JI
- Zemlja publikovanja:
Srbija
ZP
- Uže geografsko područje:
Vojvodina
UGP
- Godina:
2012.
GO
- Izdavač
Autorski reprint
IZ
- Mesto i adresa:
Prirodno-matematički fakultet,
Trg Dositeja Obradovića 4, 21000 Novi Sad
MA
- Fizički opis rada:
(5/34/12/0/8/45/0)
FO
- Naučna oblast:
Fizika
NO
- Naučna disciplina:
Fizika čvrstog stanja
ND
- Predmetna odrednica / ključne reči:
ultratanki filmovi, eksitoni,
Grinove funkcije, spektri i stanja,
permitivnost, indeksi apsorpcije i prelamanja
PO
- Čuva se:
Biblioteka Instituta za fiziku,
PMF Novi Sad
- Izvod:
U radu je primenjen metod dvovremenskih Grinovih
funkcija za određivanje permitivnosti,
te indeksa apsorpcije i prelamanja ultratankih
kristalnih filmova.
IZ
- Datum prihvatanja teme od strane Veća:
23. 04. 2012.
DP
- Datum odbrane:
.07.2012.
DO
- Članovi komisije:
 - *Predsednik:*
Dr Srdan Rakić,
vanred. profesor PMF, Novi Sad
 - *Članovi:*
Dr Jovan Setrajić,
red. profesor PMF, Novi Sad
Dr Dušan Mrđa,
*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:
Jovan Stančević
- AU
- Mentor:
Academician, Prof. Dr. Jovan Setrajić
- MN
- Title:
*Discretization of Optical Properties
of Ultrathin Molecular Films*
- NR
- Language of text:
Serbian
- LT
- Language of abstract:
English
- LA
- Country of publication:
Serbia
- CP
- Locality of publication:
Vojvodina
- LP
- Publication year:
2012.
- PY
- Publisher:
Author's reprint
- PU
- Publ.place:
*Novi Sad,
Department of Physics,
Faculty of Sciences,
Trg Dositeja Obradovića 4*
- PP
- Physical description:
(5/34/12/0/8/45/0)
- PD
- Scientific field:
Physics
- SF
- Scientific discipline:
Solid State Physics
- SD
- Key words:
*ultrathin films, excitons,
Green's functions, spectra and states,
permittivity, absorption and refraction indices*
- KW
- Holding data:
Library
- Department of Physics, Novi Sad*
- HD Note: N
- Abstract:
In this work, the method of two-time dependent Green's functions was applied to researching of the permittivity and absorption and refraction indices of ultrathin crystalline films.
- AB
- Accepted by the Scientific Board on:
23.04.2012.
- ASB
- Defended:
.07.2012.
- DE
- Work defend board:
 - DB President:
*Dr. Dr Srdan Rakić,
Associated Professor, Faculty of Sciences,
University of Novi Sad*
 - Members:
*Dr. Jovan Setrajić,
Full Professor, Faculty of Sciences,
University of Novi Sad*
 - Dr. Dušan Mrđa,
Dozent, Faculty of Sciences,
University of Novi Sad*