

D-399

УНИВЕРЗИТЕТ У НОВОМ САДУ
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ

| | |
|-------------|-------------|
| ПРИМЉЕНО: | 11. IX 1998 |
| ОРГАНИЗЈЕД: | БРОЈ |
| 0603 | 9.226 |

UNIVERZITET U NOVOM SADU
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ
INSTITUT ZA FIZIKU

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

EKSITONI U DIELEKTRIČNIM FILMOVIMA

MENTOR

PROF.DR JOVAN ŠETRAJČIĆ

KANDIDAT

SINIŠA VUČENOVVIĆ

Novi Sad, 1998. godine

*„Nauči da umeš da vodiš svoje puteve,
umesto da oni vode tebe.”*

M.Antić

Najtoplje se zahvaljujem svom mentoru prof. dr Jovanu Šetrajčiću i koleginici mr Sladjani Stojković na velikoj pomoći prilikom izrade ovoga rada. Posebno se zahvaljujem svojim roditeljima, kao i mojoj Sandri, koji su mi pružili podršku i razumevanje.

Sadržaj

| | |
|---|-----------|
| 1 Uvod | 4 |
| 2 Eksiton u balku | 5 |
| 2.1 Zakon disperzije | 5 |
| 2.2 Dielektrična permitivnost | 9 |
| 3 Eksiton u tankim filmovima | 10 |
| 3.1 Model filma | 10 |
| 3.2 Zakon disperzije | 13 |
| 3.2.1 Idealni film | 13 |
| 3.2.2 Površinski perturbovan film | 15 |
| 3.3 Lokalizovana stanja | 15 |
| 3.4 Dielektrična permitivnost | 18 |
| 4 Zaključak | 21 |
| 5 Dodatak | 22 |
| 5.1 Eksiton | 22 |
| 5.1.1 Frenkelovi eksiton | 24 |
| 5.1.2 Eksiton Vanije-Mota | 26 |
| 5.2 Mikroteorija tenzora dielektrične permitivnosti | 28 |
| 6 Literatura | 34 |



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 [1]. 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) [2,3]. 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 [4].

U ovom radu analiziran je uticaj prisustva granica film-strukture na energetski spektar eksitona (eksitonski zakon disperzije). Posebna pažnja posvećena je pojavi lokalizovanih eksitonskih stanja. Takodje su ispitane optičke osobine ovih dielektričnih filmova i izračunata njihova dielektrična permitivnost. 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 [5]. Zahvaljujući ugradjenoj statistici, taj metod se uspešno primenjuje kod izračunavanja kako mikroskopskih tako i makroskopskih, ravnotežnih i neravnotežnih svojstava kristala [6,7]. Primenjeni metod je odabran zbog pogodnosti koje nam nudi definicija polova Grinovih funkcija³.

Ovde je najpre vršena analiza idealnih beskonačnih kristalnih struktura, a zatim isti metod применjen na film-strukture.

¹Filmovi predstavljaju beskonačne strukture u svim kristalnim ravnima paralelnim dvema graničnim površima, 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 Eksiton u balku

Razmatramo svojstva eksitonskog podsistema idealnog beskonačnog kubnog kristala polazeći od standardnog eksitonskog hamiltonijana koji u konfiguracionom prostoru ima oblik:

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

gde su $P_{\vec{n}}^+$ i $P_{\vec{n}}$ - kreacioni i anihilacioni operatori eksitona na čvoru \vec{n} kristalne rešetke. Veličina $\Delta_{\vec{n}}$ - predstavlja energiju eksitona lokalizovanog na čvoru \vec{n} , a veličine $X_{\vec{n}, \vec{m}}$ i $Y_{\vec{n}, \vec{m}}$ - su matrični elementi eksitonskog transfera sa čvora \vec{n} na čvor \vec{m} [6-8].

2.1 Zakon disperzije

Svojstva posmatranog eksitonskog sistema analiziraćemo pomoću komutatorske paulionske Grinove funkcije:

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

koja zadovoljava jednačinu kretanja:

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

Korišćenjem komutatorskih relacija za Pauli-operatore [6]:

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

dobijamo:

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

gde su:

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

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

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

Na osnovu toga računamo:

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

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

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

Osnovnu teškoću teorije eksitona predstavlja činjenica da Pauli-operatori P^+ i P nisu ni Boze ni Fermi operatori, nego nekakav hibrid jednih i drugih sa kinematikom (2.4), koja je za jedan čvor fermionska, a za različite čvorove bozonska. Za precizne analize eksitonskih sistema, koje obuhvataju efekte medjueksitonske interakcije nije dovoljno samo zameniti Pauli-operatore sa Boze-operatorima. Zbog toga se u hamiltonijanu (2.1), Pauli-operatori zamenjuju svojim egzaktnim bozonskim reprezentima [6]:

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

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

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

Na taj način dobijamo:

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

Dekuplovanjem viših Grinovih funkcija pomoću poznatih Boze-komutacionih relacija:

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

članovi u izrazu (2.10) postaju:

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

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

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

gde \mathcal{N}_0 predstavlja koncentraciju eksitona:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Gornju jednačinu ćemo rešavati u najnižoj aproksimaciji:

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

takodje je:

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

i proizvodi Grinovih funkcija:

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

Dekuplovana jednačina je tada:

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

Vršimo vremenske Furije transformacije tipa:

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

nakon čega dobijamo:

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

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

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

gornja jednačina prelazi u:

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

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

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

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

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

jednačina (2.24) prelazi u:

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

Sredjivanjem gornje jednačine dobijamo:

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

Iz ove jednačine možemo izraziti Grinovu funkciju:

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

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

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

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

$$\mathcal{E}_{\vec{k}} \equiv \frac{\hbar\omega}{4|X|} = \mathcal{F}_{xy} + \mathcal{G}_z, \quad (2.30)$$

$$\mathcal{F}_{xy} = \frac{\Delta}{4|X|} - \frac{1}{2} [\cos a_x k_x + \cos a_y k_y + 1]; \quad \mathcal{G}_z = \frac{1}{2} [1 - \cos a_z k_z].$$

2.2 Dielektrična permitivnost

Dielektrična permitivnost data je izrazom (pogledati Dodatak 5.2):

$$\varepsilon^{-1}(\omega) = 1 + S \frac{2\pi}{i} [\Gamma(\omega) + \Gamma(-\omega)], \quad (2.31)$$

gde je $S = \frac{\tau_0 E_0^2}{8\pi\hbar}$. Kao što je rečeno, u nultoj aproksimaciji paulionske Grinove funkcije prelaze u bozonske, tako da je:

$$\varepsilon^{-1}(\omega) = 1 + S \frac{2\pi}{i} [G(\omega) + G(-\omega)]. \quad (2.32)$$

Izraz (2.28) možemo napisati u obliku:

$$G_{\vec{k}}(\omega) = \frac{i\hbar}{2\pi} \frac{1}{\hbar\omega - E_{\vec{k}}}, \quad (2.33)$$

gde je:

$$E_{\vec{k}} = \Delta + 2 [X_x \cos a_x k_x + X_y \cos a_y k_y + X_z \cos a_z k_z]. \quad (2.34)$$

Zamenom (2.33) u (2.32) dobijamo izraz za dielektričnu permitivnost u balku:

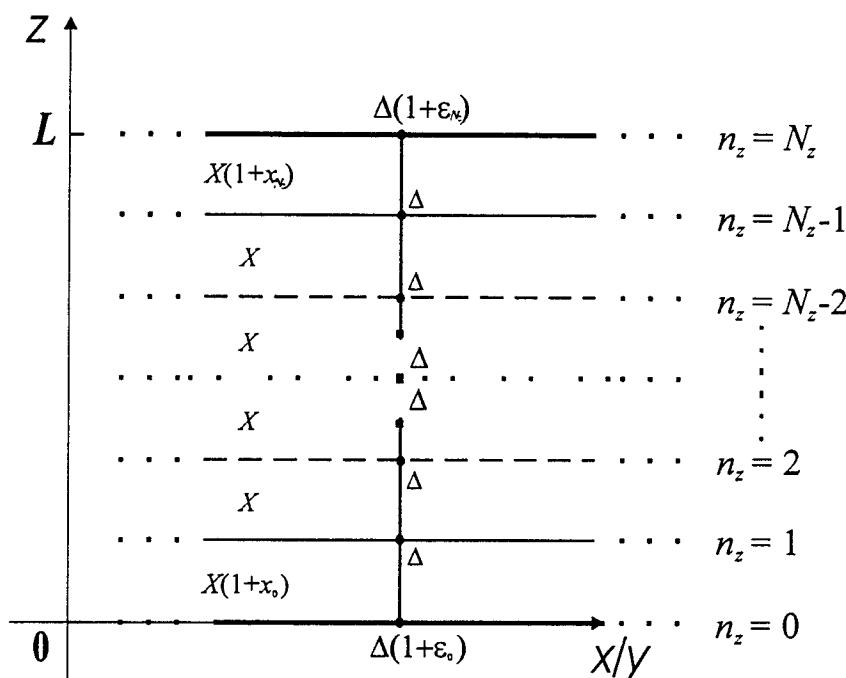
$$\varepsilon(\omega) = \left[1 + 2\hbar S \frac{E_{\vec{k}}}{(\hbar\omega)^2 - E_{\vec{k}}^2} \right]^{-1}. \quad (2.35)$$

3 Eksiton i tankim filmovima

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

3.1 Model filma

Za razliku od idealnih beskonačnih struktura, realni kristali ne poseduju osobinu translacione invarijantnosti. Postojanje izvesnih graničnih uslova, jedan je od uzroka narušenja simetrije [2,3]. Sistemi koji imaju dve paralelne granične površine nazivaju se filmovima. Posmatra se idealni tanki film kubne kristalne strukture, načinjen na substratu nekim tehnološkim postupkom (naparavanjem, spaterovanjem i sl.). Pojam idealni film koristi se u smislu nenarušenja kristalne strukture (bez prisustva defekata, primesa i sl.), a ne u smislu prostorne neograničenosti. 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 površine paralelne XY ravnima i to za: $z = 0$ i $z = L$ (slika 3.1).



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

Za izračunavanje eksitonskih energija u filmu polazimo od jednačine (2.24) gde zbog izmenjenih uslova na granicama filma uzimamo da su perturbacione energije eksitona u površinskim ravnima $n_z = 0$ i $n_z = N_z$:

$$\Delta_{\vec{n}} \equiv \Delta (1 + \epsilon_0 \delta_{n_z,0} + \epsilon_{N_z} \delta_{n_z,N_z}) \quad (3.1)$$

(veličine ϵ su površinski parametri), a perturbacija energije transfera ka površinskim slojevima duž z -pravca:

$$X_{\vec{n},\vec{n}+\vec{\lambda}_z} \equiv X_z (1 + x_0 \delta_{n_z,0} + x_{N_z} \delta_{n_z,N_z-1}) ; \quad X_{\vec{n},\vec{n}-\vec{\lambda}_z} \equiv X_z (1 + x_0 \delta_{n_z,1} + x_{N_z} \delta_{n_z,N_z}) . \quad (3.2)$$

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

Zbog prostorne ograničenosti filma u z -pravcu koristi se delimična prostorna Furije-transformacija:

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

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

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

$$\begin{aligned} & \hbar \omega \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} e^{ik_x a_x (n_x - m_x)} e^{ik_y a_y (n_y - m_y)} G_{n_z m_z} = \\ &= \frac{i\hbar}{2\pi} \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} e^{ik_x a_x (n_x - m_x)} e^{ik_y a_y (n_y - m_y)} \delta_{n_z m_z} + \\ &+ \Delta (1 + \epsilon_0 \delta_{n_z,0} + \epsilon_{N_z} \delta_{n_z,N_z}) \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} e^{ik_x a_x (n_x - m_x)} e^{ik_y a_y (n_y - m_y)} G_{n_z, m_z} + \\ &+ X_x \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} e^{ik_x a_x (n_x + 1 - m_x)} e^{ik_y a_y (n_y - m_y)} G_{n_z, m_z} + \\ &+ X_x \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} e^{ik_x a_x (n_x - 1 - m_x)} e^{ik_y a_y (n_y - m_y)} G_{n_z, m_z} + \quad (3.5) \\ &+ X_y \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} e^{ik_x a_x (n_x - m_x)} e^{ik_y a_y (n_y + 1 - m_y)} G_{n_z, m_z} + \\ &+ X_y \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} e^{ik_x a_x (n_x - m_x)} e^{ik_y a_y (n_y - 1 - m_y)} G_{n_z, m_z} + \\ &+ X_z (1 + x_0 \delta_{n_z,0} + x_{N_z} \delta_{n_z,N_z-1}) \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} e^{ik_x a_x (n_x - m_x)} e^{ik_y a_y (n_y - m_y)} G_{n_z+1, m_z} + \\ &+ X_z (1 + x_0 \delta_{n_z,1} + x_{N_z} \delta_{n_z,N_z}) \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} e^{ik_x a_x (n_x - m_x)} e^{ik_y a_y (n_y - m_y)} G_{n_z-1, m_z} . \end{aligned}$$

Daljim sredjivanjem se dobija:

$$\begin{aligned} & G_{n_z m_z} \left[-\frac{\hbar\omega - \Delta - 2(X_x \cos a_x k_x + X_y \cos a_y k_y)}{X_z} + \frac{\Delta}{X_z} (\epsilon_0 \delta_{n_z,0} + \epsilon_{N_z} \delta_{n_z,N_z}) \right] + \\ & + G_{n_z+1, m_z} (1 + x_0 \delta_{n_z,0} + x_{N_z} \delta_{n_z, N_z-1}) + \\ & + G_{n_z-1, m_z} (1 + x_0 \delta_{n_z,1} + x_{N_z} \delta_{n_z, N_z}) = -\frac{i\hbar}{2\pi X_z} \delta_{n_z, m_z}, \end{aligned} \quad (3.6)$$

odnosno:

$$\begin{aligned} & G_{n_z m_z} [\varrho + \frac{\Delta}{X_z} (\epsilon_0 \delta_{n_z,0} + \epsilon_{N_z} \delta_{n_z,N_z})] + G_{n_z+1, m_z} (1 + x_0 \delta_{n_z,0} + x_{N_z} \delta_{n_z, N_z-1}) + \\ & + G_{n_z-1, m_z} (1 + x_0 \delta_{n_z,1} + x_{N_z} \delta_{n_z, N_z}) = -\frac{i\hbar}{2\pi X_z} \delta_{n_z, m_z}, \end{aligned} \quad (3.7)$$

gde je uvedena smena:

$$\varrho = -\frac{\hbar\omega - \Delta - 2(X_x \cos a_x k_x + X_y \cos a_y k_y)}{X_z}. \quad (3.8)$$

Jednačina (3.7) predstavlja nehomogen sistem od $N_z + 1$ algebarskih diferencnih jednačina sa uslovima $G_{n_z, m_z} = 0$, za $n_z < 0$ i $n_z > N_z + 1$.

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

$$\mathcal{D}_{N_z+1} \equiv 0, \quad (3.9)$$

gde je determinanta sistema (3.7) data u sledećem obliku:

$$\mathcal{D}_{N_z+1}(\varrho) = \begin{vmatrix} \varrho + \frac{\Delta}{X_z} \epsilon_0 & 1 + x_0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 + x_0 & \varrho & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \varrho & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \ddots & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & \varrho & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & \varrho & 1 + x_{N_z} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 + x_{N_z} & \varrho + \frac{\Delta}{X_z} \epsilon_{N_z} \end{vmatrix}_{N_z+1} \quad (3.10)$$

3.2 Zakon disperzije

Uslov (3.9) rešavaćemo za slučaj idealnog filma i površinski perturbovanog filma.

3.2.1 Idealni film

U ovom slučaju granični parametri su [9,10]:

$$\epsilon_0 = \epsilon_{N_z} = 0 ; \quad x_0 = x_{N_z} = 0 , \quad (3.11)$$

tako da determinanta (3.10) prelazi u:

$$\mathcal{D}_{N_z+1}(\varrho) = \begin{vmatrix} \varrho & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & \varrho & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \varrho & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & \varrho & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & \varrho & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & \varrho \end{vmatrix}_{N_z+1} \quad (3.12)$$

Poznato je da rešenja ove determinante predstavljaju Čebiševljev polinom:

$$\mathcal{D}_{N_z+1}(\varrho) = \mathcal{C}_{N_z+1}(\zeta) = \frac{\sin((N_z+2)\zeta)}{\sin \zeta} ; \quad \varrho = 2 \cos \zeta , \quad (3.13)$$

gde Čebiševljevi polinomi zadovoljavaju poznatu rekurentnu relaciju oblika:

$$\mathcal{C}_{n+1}(x) = x\mathcal{C}_n(x) - \mathcal{C}_{n-1}(x) . \quad (3.14)$$

Iz uslova (3.9), tj. za $\mathcal{C}_{N_z+1} \equiv 0$, dobija se:

$$\zeta_\nu = \frac{\pi \nu}{N_z + 2} ; \quad \nu = 1, 2, 3, \dots, N_z + 1 . \quad (3.15)$$

Na osnovu ovoga i jednačine smene (3.8) nalazimo:

$$\hbar\omega_\nu = \Delta + 2 \left(X_x \cos a_x k_x + X_y \cos a_y k_y - X_z \cos \frac{\pi \nu}{N_z + 2} \right) . \quad (3.16)$$

Radi poredjenja sa zakonom disperzije eksitona u balku i ovaj izraz ćemo napisati u jednostavnijoj formi ($X_x = X_y = X_z = X$ i $\varrho_\nu = -2 \cos a_z k_z(\mu)$):

$$\mathcal{E}_{k_x k_y}(\mu/\nu) = \mathcal{F}_{xy} + \mathcal{G}_z(\mu/\nu) ; \quad \mathcal{G}_z(\mu/\nu) = \frac{1}{2} [1 - \cos a_z k_z(\mu)] \equiv \frac{2 + \varrho_\nu}{4} . \quad (3.17)$$

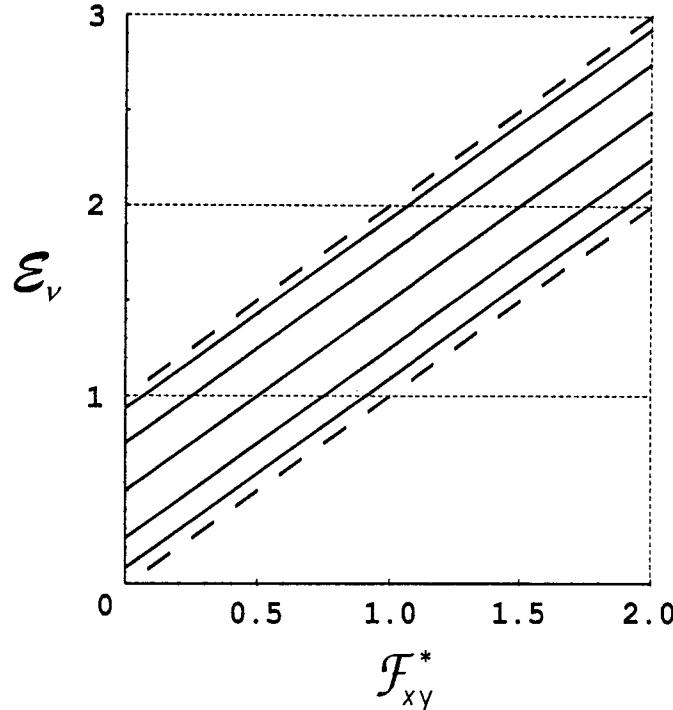
Prethodni izraz (3.17) predstavlja zakon disperzije eksitona idealnog filma, (grafički je prikazan na slici 3.2) i ima istu formu kao izraz (2.30) dobijen za idealne neograničene strukture, s razlikom što je tamo k_z praktično kontinualno promenljivo (u intervalu $[0, \pi/a]$)⁴ kao što su k_x i k_y , a ovde je diskretno i dato je izrazom:

$$k_z(\mu) = \frac{\pi}{a_z} \frac{\mu}{N_z + 2} , \quad (3.18)$$

gde je uvedena smena indeksa $\mu = N_z + 1 - \nu$, $\mu = 1, 2, \dots, N_z + 1$.

⁴Posmatramo samo „desnu” polovinu spektra ($k_j \geq 0$, $j = x, y, z$) znajući da je on ogledalski simetričan.

Na slici 3.2 prikazan je zakon disperzije eksitona u filmu, gde je izmedju ispreki-danih linija predstavljena zona kontinualnih dozvoljenih energija eksitona u idealnim (neograničenim) strukturama, dok su punim linijama označene diskretne vrednosti eksitonskih energija u filmu⁵.



Slika 3.2: Zakon disperzije eksitona u idealnom filmu

Pored toga, uočava se da je:

$$k_x^{\min} = k_y^{\min} = 0 ; \quad k_z^{\min} = \frac{\pi}{a} \frac{1}{N_z + 2} > 0 , \quad (3.19)$$

pošto je u pitanju tanak film, odnosno: $N_z \ll (N_x, N_y)$ i:

$$k_x^{\max} = k_y^{\max} = \frac{\pi}{a} ; \quad k_z^{\max} = \frac{\pi}{a} \frac{N_z + 1}{N_z + 2} < \frac{\pi}{a} . \quad (3.20)$$

Izmedju minimalne i maksimalne vrednosti za k_z , pa prema tome i za $\epsilon_{\vec{k}}$, postoji još $N_z - 1$ -a diskretna vrednost.

U skladu sa gore pomenutim, dolazimo do zaključka da eksitonski spektar u tankom filmu poseduje dva energetska gepa, donji g i gornji h :

$$g \equiv \epsilon_f^{\max} - \epsilon_b^{\min} = \frac{1}{4} \left(\frac{\pi}{N_z + 2} \right)^2 = \epsilon_b^{\max} - \epsilon_f^{\max} \equiv h \quad (3.21)$$

(indeks f označava film, a b beskonačnu strukturu). Vidi se, da veličine gepova parabolički opadaju sa debljinom filma (kvadratna zavisnost). To znači da je njihova praktična egzistencija vezana samo za ultratanke (nano) strukture.

⁵Na apscisi je veličina $F_{xy}^* \equiv 14 + F_{xy}$, jer je za tipične vrednosti molekulskih kristala $\frac{\Delta}{|X|} = 50$.

3.2.2 Površinski perturbovan film

Posmatraćemo slučaj simetrično perturbovanog filma, odnosno takvog kod kojeg su granični parametri:

$$\epsilon_0 = \epsilon_{N_z} = \epsilon; \quad x_0 = x_{N_z} = x. \quad (3.22)$$

Ako ove parametre zamenimo u determinantu (3.10) i njenim razvijanjem po prvoj koloni ili prvoj vrsti:

$$\mathcal{D}_{N_z+1} = \left(\varrho + \frac{\Delta}{X_z} \epsilon \right) \mathcal{D}_{N_z} - (1+x)^2 \mathcal{D}_{N_z-1}, \quad (3.23)$$

gde je \mathcal{D}_{N_z} determinanta oblika:

$$\mathcal{D}_{N_z} = \begin{vmatrix} \varrho & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & \varrho & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \varrho & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & \varrho & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & \varrho & 1+x \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1+x & \varrho + \frac{\Delta}{X_z} \epsilon \end{vmatrix}_{N_z}. \quad (3.24)$$

Još jednim razvijanjem gornjih determinanti po zadnjoj vrsti ili koloni dobijamo rekurentnu relaciju:

$$\mathcal{D}_{N_z} = \left(\varrho + \frac{\Delta}{X_z} \epsilon \right) \mathcal{C}_{N_z-1} - (1+x)^2 \mathcal{C}_{N_z-2}, \quad (3.25)$$

gde veličine \mathcal{C}_{N_z} predstavljaju Čebiševljeve polinome koji zadovoljavaju rekurentnu relaciju (3.14). Na osnovu toga konačno dobijamo determinantu sistema površinski simetrično perturbovanog filma u razvijenom obliku:

$$\mathcal{D}_{N_z+1} = \left(\varrho + \frac{\Delta}{X_z} \epsilon \right) \mathcal{C}_{N_z-1} - 2 \left(\varrho + \frac{\Delta}{X_z} \epsilon \right) (1+x)^2 \mathcal{C}_{N_z-2} + (1+x)^4 \mathcal{C}_{N_z-3}. \quad (3.26)$$

Rešavanje uslova (3.9), uz jednačinu (3.26), moguće je izvršiti numeričkim putem za zadate vrednosti graničnih parametara. Rezultati ove procedure prikazani su tabeli 3.1.

3.3 Lokalizovana stanja

Iz uslova $\varrho = 2 \cos \zeta_\nu$ vidi se da je $\varrho \in [-2, 2]$. Definišimo sada maksimalnu eksitonsku energiju u balku koju možemo dobiti iz izraza (3.8):

$$\hbar\omega_{\max}^b = \Delta - 2(X_x + X_y + X_z), \quad (3.27)$$

ovde se podrazumeva da su energije transfera negativne, a vidi se da je $\cos a_x k_x = -1$, $\cos a_y k_y = -1$ i $\cos a_z k_z = -1$. Za film se može napisati analogan uslov za z pravac: $\varrho = 2$. Da bi dobili lokalizovana stanja, maksimalno moguća energija u filmu mora biti veća od maksimalno moguće balkovske energije:

$$\hbar\omega_{\max}^f > \hbar\omega_{\max}^b. \quad (3.28)$$

Zamenjujući $\hbar\omega_{\max}^f$ sa izrazom (3.16) i uzimajući u obzir nejednakost (3.28) dobijamo da je u slučaju pojave gornjih lokalizovanih stanja $\varrho > 2$.

| Tabela 3.1 | | Lokalizovana stanja eksitona u petoslojnom filmu | | | | |
|--------------------|-----|--|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|
| Granični parametri | | Redukovane energije | | | | |
| ϵ | x | \mathcal{G}_1 | \mathcal{G}_2 | \mathcal{G}_3 | \mathcal{G}_4 | \mathcal{G}_5 |
| - 0.1 | -3 | -0.935 | -0.925 | 0.250 | 0.675 | 0.935 |
| | -2 | -0.802 | -0.798 | 0.179 | 0.548 | 0.873 |
| | -1 | -0.750 | -0.750 | 0.146 | 0.500 | 0.854 |
| | 0 | -0.802 | -0.798 | 0.179 | 0.548 | 0.873 |
| | 1 | -0.935 | -0.925 | 0.250 | 0.675 | 0.935 |
| | 2 | -1.116 | -1.101 | 0.322 | 0.851 | 1.044 |
| | 3 | -1.321 | -1.304 | 0.376 | 1.054 | 1.194 |
| 0.0 | -3 | -0.112 | 0.000 | 0.500 | 1.000 | 1.112 |
| | -2 | 0.067 | 0.250 | 0.500 | 0.750 | 0.933 |
| | -1 | 0.146 | 0.500 | 0.500 | 0.500 | 0.854 |
| | 0 | 0.067 | 0.250 | 0.500 | 0.750 | 0.933 |
| | 1 | -0.112 | 0.000 | 0.500 | 1.000 | 1.112 |
| | 2 | -0.329 | -0.250 | 0.500 | 1.250 | 1.329 |
| | 3 | -0.561 | -0.500 | 0.500 | 1.500 | 1.561 |
| 0.1 | -3 | 0.065 | 0.325 | 0.750 | 1.925 | 1.935 |
| | -2 | 0.127 | 0.452 | 0.821 | 1.798 | 1.802 |
| | -1 | 0.146 | 0.500 | 0.854 | 1.750 | 1.750 |
| | 0 | 0.127 | 0.452 | 0.821 | 1.798 | 1.802 |
| | 1 | 0.065 | 0.325 | 0.750 | 1.925 | 1.935 |
| | 2 | -0.044 | 0.149 | 0.678 | 2.101 | 2.116 |
| | 3 | -0.194 | -0.054 | 0.624 | 2.304 | 2.321 |

Prvo treba odrediti vezu izmedju parametara ϵ i x kada se najviša energija u filmu poklapa sa gornjom granicom balkovskog energetskog spektra. Uzimajući da je $\varrho = 2$, iz rekurentne relacije (3.14) sledi da je $\mathcal{C}_n(2) = n + 1$, pri čemu je $\mathcal{C}_0(x) = 1$. Uvrštavanjem u jednačinu (3.26), uz uslov (3.9) sledi:

$$(2 + p\epsilon)^2 \mathcal{C}_{N_z-1} - 2(1+x)^2 (2 + p\epsilon) \mathcal{C}_{N_z-2} + (1+x)^4 \mathcal{C}_{N_z-3} = 0 , \quad (3.29)$$

gde je uvedena smena $p = \frac{\Delta}{X_z}$. Odavde se dalje dobija:

$$[2 + p\epsilon - (1+x)^2] [N_z + 2(1+x)^2] = 0 ,$$

odnosno:

$$\epsilon > \frac{(1+x)^2 - 2}{p} , \quad (3.30)$$

što predstavlja traženu vezu izmedju parametara ϵ i x u slučaju pojave gornjih lokalizovanih stanja. Ispravan znak nejednakosti se nalazi na osnovu poznate činjenice da se za vrednosti površinskih energetskih parametara $\epsilon = x = 0$ ne pojavljuju lokalizovana eksitonska stanja.

Donja lokalizovana stanja dobijaju se u slučaju kada je minimalna energija u eksiton-skom spektru filma manja od donje energetske granice balka, tj:

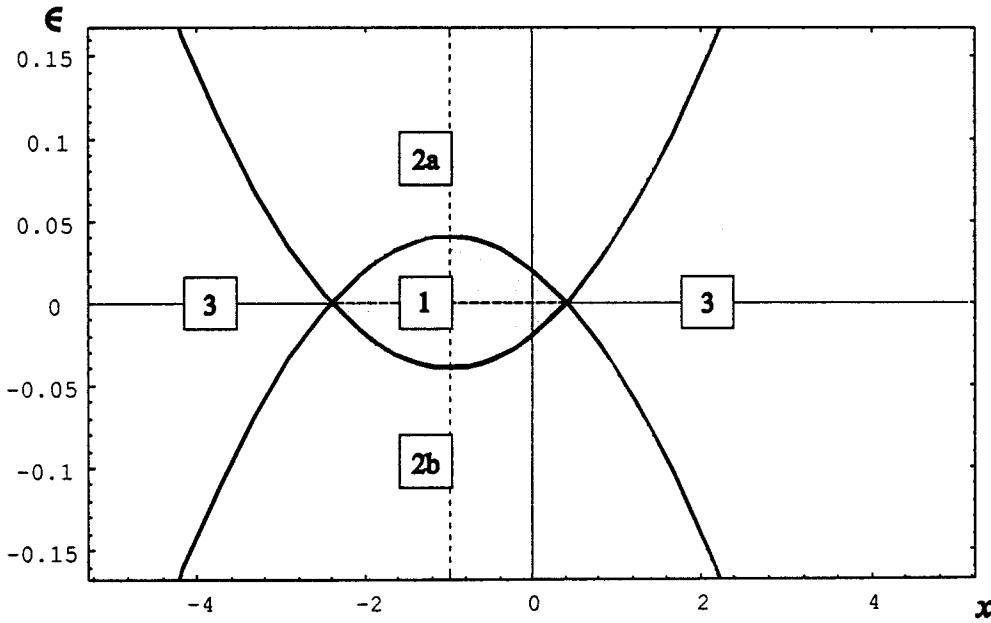
$$\hbar\omega_{\min}^b = \Delta + 2(X_x + X_y + X_z) . \quad (3.31)$$

Pri tome su: $\cos a_{x/y/z} k_{x/y/z} = 1$. Analogan uslov za z pravac u slučaju kristalnog filma je: $\varrho = -2$, tj. sličnom procedurom kao u predhodnoj analizi dobijamo da je u slučaju pojave donjih lokalizovanih stanja $\varrho < -2$. U ovom slučaju Čebiševljevi polinomi imaju oblik $C_n(-2) = (-1)^n(n+1)$. Istim postupkom sledi:

$$\epsilon < \frac{2 - (1+x)^2}{p} , \quad (3.32)$$

što predstavlja uslov za pojavu donjih lokalizovanih stanja.

Pod pojmovima gornja i donja lokalizovana stanja se podrazumevaju energetski nivoi iznad i ispod odgovarajućih granica u energetskom spektru balka. Na slici 3.3 prikazane su oblasti egzistencije lokalizovanih i nelokalizovanih stanja u zavisnosti od veličine i odnosa graničnih energetskih parametara $\epsilon = \epsilon(x)$: 1 - oblast balk (nelokalizovanih) stanja, 2a - oblast gornjih lokalizovanih stanja, 2b - oblast donjih lokalizovanih stanja i 3 - oblast koegzistencije gornjih i donjih lokalizovanih stanja.



Slika 3.3: Fazni dijagram pojava lokalizovanih eksitonskih stanja

Prostorni raspored (da li su to površinska stanja) ovde nije određen i predmet je posebnih analiza u kojima se nalazi prostorna distribucija verovatnoće nalaženja eksitonskih stanja.

U tabeli 3.1 lokalizovana stanja su označena zadebljanim brojevima: negativnim brojevima odgovaraju donja, a pozitivnim brojevima većim od jedinice - gornja lokalizovana stanja.

3.4 Dielektrična permitivnost

Izračunavanje dielektrične permitivnosti ograničimo na slučaj idealnog filma. Sistem jednačina (3.7) u ovom slučaju, gde su granični parametri (3.11), ima oblik:

$$\varrho G_{n_z, m_z} + G_{n_z+1, m_z} + G_{n_z-1, m_z} = -\frac{i\hbar}{2\pi X_z} \delta_{n_z, m_z}. \quad (3.33)$$

Da bismo Grinove funkcije izrazili preko Čebiševljevih polinoma koristimo se rekurentnom relacijom (3.14), kao i početnim uslovima $\mathcal{C}_0(\varrho) = 1$ i $\mathcal{C}_1(\varrho) = \varrho$. Ako stavimo da je $n_z = 0$, iz (3.33) dobijamo:

$$G_{1, m_z} = -\frac{i\hbar}{2\pi X_z} \delta_{0, m_z} \mathcal{C}_0 - G_{0, m_z} \mathcal{C}_1,$$

tj. dobijamo G_{1, m_z} izraženo preko G_{0, m_z} . Induktivnim postupkom za $n_z = n_z$ dobijamo G_{n_z, m_z} izraženo preko G_{0, m_z} :

$$G_{n_z, m_z} = -\frac{i\hbar}{2\pi X_z} \sum_{j=0}^{n_z-1} (-1)^j \delta_{n_z-1-j, m_z} \mathcal{C}_j + (-1)^{n_z} G_{0, m_z} \mathcal{C}_{n_z}. \quad (3.34)$$

Nepoznatu veličinu G_{0, m_z} iz prethodnog izraza izračunavamo iz zadnje jednačine sistema ($n_z = N_z$):

$$\varrho G_{N_z, m_z} + G_{N_z-1, m_z} = -\frac{i\hbar}{2\pi X_z} \delta_{N_z, m_z}, \quad (3.35)$$

u koju ubacujemo uopšteni izraz (3.34) i daljim sredjivanjem dobijamo:

$$G_{0, m_z} = -\frac{i\hbar}{2\pi X_z} (-1)^{-m_z} \frac{\mathcal{C}_{N_z-m_z}}{\mathcal{C}_{N_z+1}}. \quad (3.36)$$

Ovako izračunat G_{0, m_z} ubacimo u izraz (3.34) i konačno dobijamo Grinovu funkciju izraženu preko Čebiševljevih polinoma:

$$G_{n_z, m_z} = -\frac{i\hbar}{2\pi X_z} (-1)^{n_z-m_z} \left[\frac{\mathcal{C}_{N_z-m_z} \mathcal{C}_{n_z} - \mathcal{C}_{n_z-m_z-1} \mathcal{C}_{N_z+1}}{\mathcal{C}_{N_z+1}} \right]. \quad (3.37)$$

Za izračunavanje dielektrične permitivnosti potrebni su nam dijagonalni članovi:

$$G_{n_z, n_z} = -\frac{i\hbar}{2\pi X_z} \frac{\mathcal{C}_{N_z-n_z} \mathcal{C}_{n_z}}{\mathcal{C}_{N_z+1}}. \quad (3.38)$$

Izraz za dielektričnu permitivnost (2.31) u slučaju idealnog filma, u nultoj aproksimaciji, ima oblik:

$$\varepsilon_{n_z}^{-1}(\omega) = 1 + S \frac{2\pi}{i} [G_{n_z, n_z}(\omega) + G_{n_z, n_z}(-\omega)]. \quad (3.39)$$

Uvodimo smene:

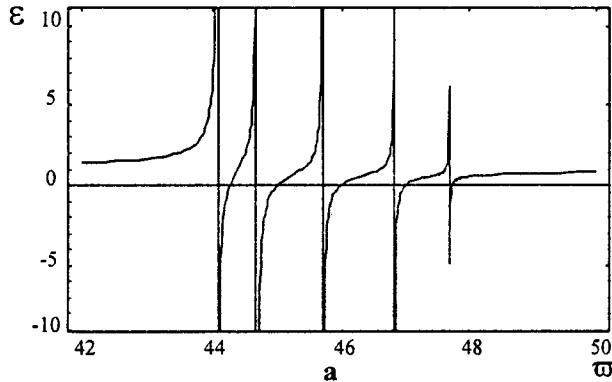
$$\varrho^\pm = \frac{\pm i\hbar\omega - \Delta - 2(X_x \cos a_x k_x + X_y \cos a_y k_y)}{|X_z|}, \quad (3.40)$$

$$\tilde{\omega} = \frac{\hbar\omega}{|X_z|}; \quad |p| = \frac{\Delta}{|X_z|}; \quad X_x = X_y = X_z \equiv X. \quad (3.41)$$

Za centar Briluenove zone je $k_x = k_y = 0$, pa je $\varrho^+ = \tilde{\omega} - |p| + 4$; $\varrho^- = -\tilde{\omega} - |p| + 4$. Takodje se uočava odnos izmedju ϱ^+ i ϱ^- : $\varrho^- = \varrho^+ - 2\tilde{\omega}$.

Zamenom gornjih izraza u (3.39) dobija se izraz za dielektričnu permitivnost idealnog filma:

$$\varepsilon_{n_z}(\omega) = \left\{ 1 + \hbar \frac{S}{|X|} \left[\frac{\mathcal{C}_{N_z-n_z}(\varrho^+) \mathcal{C}_{n_z}(\varrho^+)}{\mathcal{C}_{N_z+1}(\varrho^+)} + \frac{\mathcal{C}_{N_z-n_z}(\varrho^-) \mathcal{C}_{n_z}(\varrho^-)}{\mathcal{C}_{N_z+1}(\varrho^-)} \right] \right\}^{-1}, \quad (3.42)$$

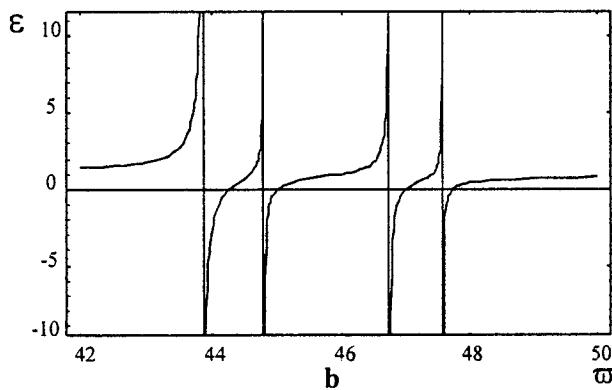


tj.

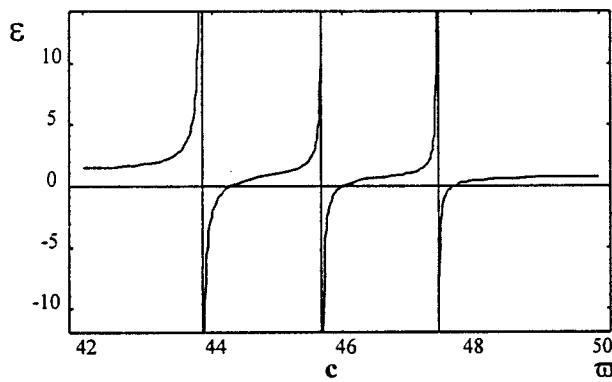
$$\varepsilon_{n_z} = \{1 + \gamma f_{n_z}(\omega)\}^{-1}, \quad (3.43)$$

gde su:

$$\begin{aligned} \gamma &= \hbar \frac{S}{|X|}; \\ f_{n_z}(\omega) &= \frac{\mathcal{C}_{N_z-n_z}(\varrho^+) \mathcal{C}_{n_z}(\varrho^+)}{\mathcal{C}_{N_z+1}(\varrho^+)} + \\ &+ \frac{\mathcal{C}_{N_z-n_z}(\varrho^-) \mathcal{C}_{n_z}(\varrho^-)}{\mathcal{C}_{N_z+1}(\varrho^-)}. \end{aligned}$$



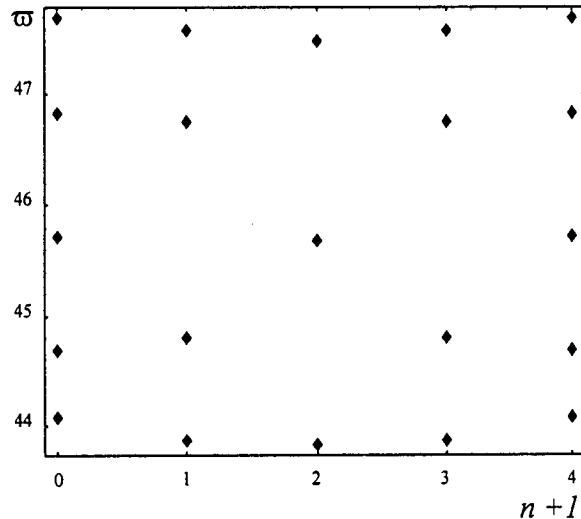
Na slici 3.4 je prikazana zavisnost dielektrične permitivnosti od redukovane energije spoljašnjeg elektromagnetskog polja - za petoslojni film ($N_z = 4$). Zavisnost je računata za centar Briluenove zone ($k_x = k_y = 0$), pa duž z ose dobijamo konačan broj rezonantnih pikova jer je k_z komponenta eksitonskog talasnog vektora diskretna. Samo za odredjene vrednosti z komponente eksitonskog talasnog vektora (k_z), pri datim vrednostima k_x i k_y može da dođe do apsorpcije elektromagnetskog zračenja. Grafik a predstavlja zavisnost $\varepsilon = \varepsilon(\tilde{\omega})$ za $n_z = 0$ ili 4 , grafik b za $n_z = 1$ ili 3 , a grafik c za $n_z = 2$.



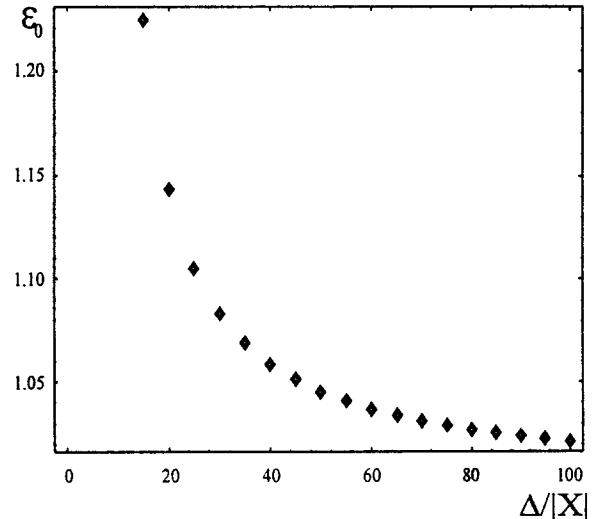
Slika 3.4: Zavisnost dielektrične permitivnosti od redukovane energije spoljašnjeg elektromagnetskog polja

Postavlja se pitanje za koje frekvencije se dobijaju rezonantni pikovi, tj. za koje frekvencije $\varepsilon_{n_z} \rightarrow \infty$. Iz (3.43) se vidi da je to ispunjeno za $1 + \gamma f_{n_z}(\omega) = 0$

Na slici 3.5 prikazana je zavisnost $\tilde{\omega} = \tilde{\omega}(n_z)$, gde tačke predstavljaju one frekvencije za koje $\varepsilon_{n_z} \rightarrow \infty$.



Slika 3.5: Prostorna raspodela (duž z -pravca u filmu) rezonantnih redukovanih energija spoljašnjeg polja (kad $\varepsilon_{n_z} \rightarrow \infty$)



Slika 3.6: Zavisnost statičke dielektrične permitivnosti od odnosa energetskih parametara eksitonskog sistema

Veličina $|p| = \frac{\Delta}{|X_z|}$ je osobina kristala i predstavlja odnos energije eksitona i energije transfera duž z -pravca. Na slici 3.6 je prikazana funkcionalna zavisnost statičke dielektrične permitivnosti (kada nema upadnog elektromagnetskog zračenja, tj. $\tilde{\omega} = 0$) od veličine $|p|$, u ovom slučaju računata za $n_z = 0$.

4 Zaključak

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

1. Ove analize su pokazale bitne razlike u zakonu disperzije eksitona u pomenuta dva sistema, kao isključive posledice postojanja granica film-struktura, u kojima energetski spektri poseduju dva gepa. Veličine gepova zavise od debljine filma i veoma brzo opadaju sa njenim povećanjem.
2. Postojanje graničnih uslova ima za posledicu promenu širine energetske zone eksitona. U odnosu na zonu dozvoljenih energija idealnih struktura sa praktično kontinualnim rasporedom, zona eksitonski dozvoljenih energija u filmu je izrazito diskretna sa konačnim brojem mogućih energetskih nivoa koji je proporcionalan broju atomskih ravnih duž z -pravca. Povećanjem broja slojeva filma povećava se broj diskretnih stanja unutar zone dozvoljenih energija, kao i sama širina ove zone.
3. Povećanjem eksitonske energije na graničnim površinama filma (povećanjem parametra ϵ) dolazi do pomeranja energetskog spektra ka višim energijama (povećava se donji, a smanjuje gornji energetski gep), dok se povećanjem absolutne vrednosti energije transfera eksitona izmedju površinskih i njima susednih slojeva filma (povećanjem parametra $|1+x|$) spektar širi prema granicama balkovske zone (smanjuju se oba gepa). Pri tome se uočava simetrija u spektrima energija eksitona u odnosu na $x = -1$.
4. Za neke vrednosti pomenutih parametara energetska zona eksitona izlazi van zone eksitonskih energija neograničenog kristala. U tom slučaju pojavljuju se lokalizovana eksitonska stanja. Energije ovih stanja zavise od debljine filma - povećanjem debljine filma teže granicama balkovske energetske zone, čime zapravo prestaju da budu lokalizovana stanja. Uočljiva je i izražena zavisnost veličine energije lokalizovanih stanja eksitona od vrednosti graničnih energetskih parametara. Zbog toga se balkovske energije mogu dobiti samo u kompletном termodinamičkom limesu koji podrazumeva istrovemeni prelaz: $\epsilon \rightarrow 0$, $x \rightarrow 0$ i $N_z \rightarrow \infty$.
5. Analiza zavisnosti dielektrične permitivnosti od frekvencije spoljašnjeg elektromagnetskog polja je pokazala pojavu rezonantnih pikova. Broj tih pikova veći je na graničnim površinama filma (gde su rezonantne frekvencije više) nego u unutrašnjosti filma (gde su rezonantne frekvencije niže).

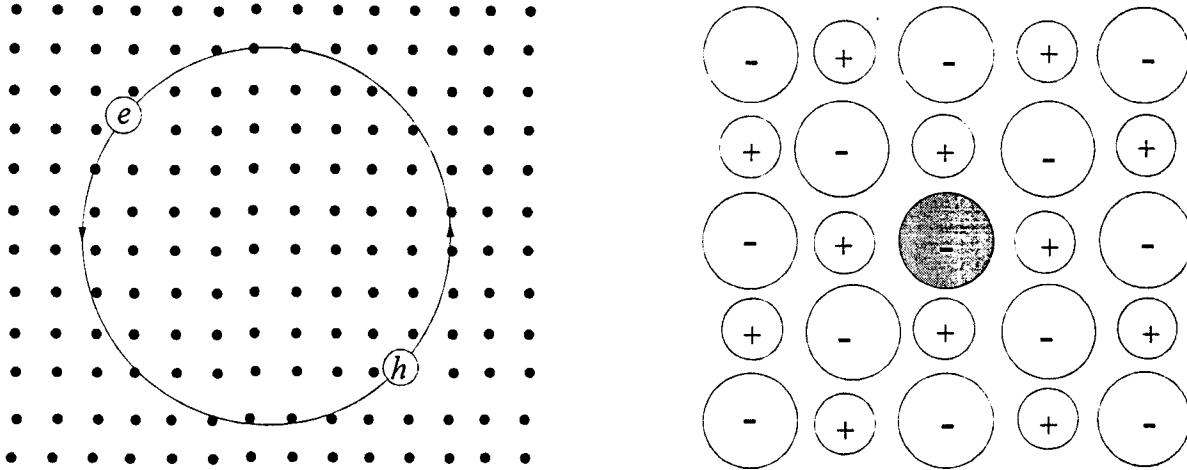
5 Dodatak

Eksitoni i dielektrična permitivnost

U ovom delu biće izneti neki poznati literarni podaci o kvazičesticama eksitonima, kao i osnove mikroteorije dielektrične permitivnosti.

5.1 Eksitoni

Apsorpcioni i refleksioni spektri često pokazuju strukturu za fotonsku energiju ispod energetskog gepa, gde bi inače očekivali da kristal bude transparentan. Ovakva struktura prouzrokovana je apsorpcijom fotona i kreacijom para elektron - šupljina. Elektron i šupljina su vezani privlačnom Kulonovom interakcijom slično kao što je elektron vezan sa protonom u formu neutralnog atoma vodonika. Ovakav par elektron - šupljina se naziva eksiton [11]. Na slici 5.1a prikazan je eksiton Vanije-Mota koji je slabo vezan, sa srednjom udaljenošću elektron - šupljina velikom u poređenju sa konstantom rešetke. Na slici 5.1b je šematski predstavljen jako vezan ili Frenkelov eksiton, lokalizovan u (100) ravni kristala alaklnog halogenida. Jedan idealan Frenkelov eksiton će prolaziti kroz ceo kristal kao talas, ali elektron će uvek biti u neposrednoj blizini šupljine.



a) Eksiton Vanije-Mota

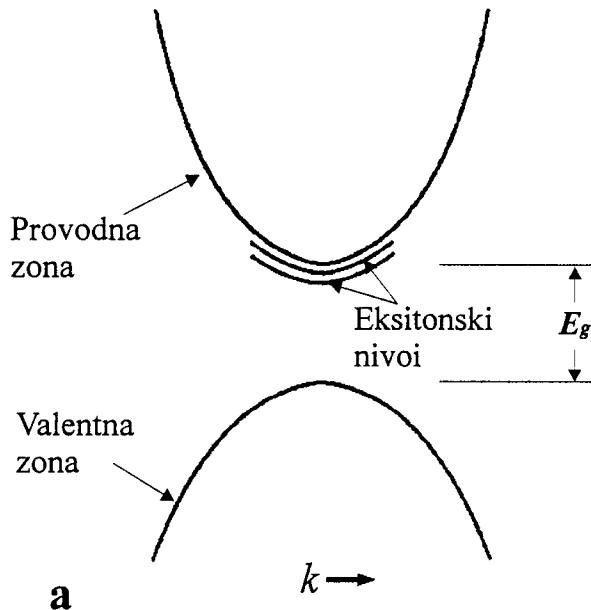
b) Frenkelov eksiton

Eksiton se može kretati kroz kristal i prenosi energiju, ali eksiton ne prenosi nanelektrisanje, jer je električno neutralan. On je sličan pozitronijumu koji je sastavljen od elektrona i pozitrona. Eksiton može biti formiran u svakom izolatoru. Kada je vezani gep indirektan eksiton u blizini direktnog gepa mogu biti nestabilni, pa se raspadaju u slobodni elektron i slobodnu šupljinu⁶. Eksiton mogu formirati i komplekse, kao što su bieksitoni - kreirani od dva eksitona.

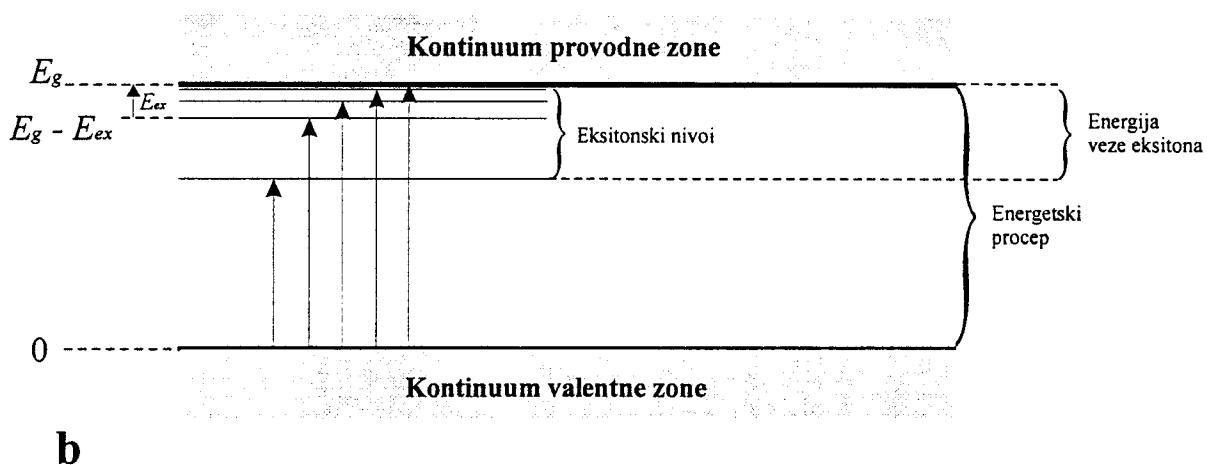
Videli smo da se slobodni elektron i slobodna šupljina kreiraju kad god je energija fotona veća od energije gepa. Prag za ovaj proces je $\hbar\omega > E_g$ u direktnom procesu. U indirektnom procesu prag je manji za energiju fonona $\hbar\Omega$. Međutim, sama energija veze

⁶Svi eksitonii su nestabilni i imaju relativno malo vreme života (singletni 10^{-8} s, a tripletni i do 10^{-3} s).

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 eksitonii ispod energetskog gepa su prikazani na slikama 5.2a i 5.2b. Slika 5.2a prikazuje eksitonki nivoi 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 eksitonii 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.

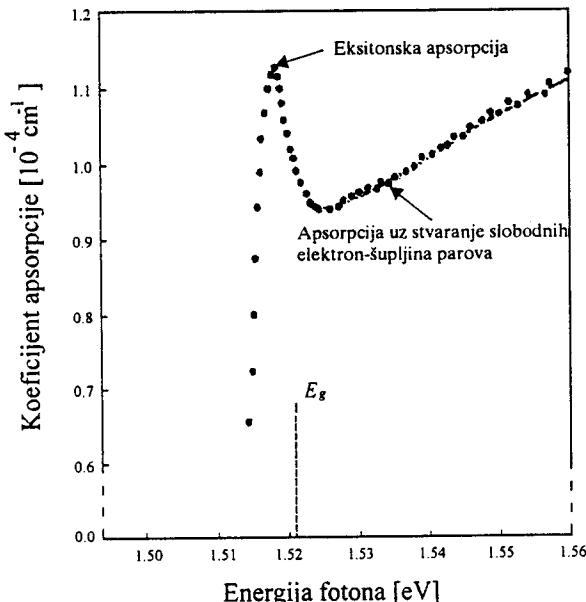


Slika 5.2: Energetski nivoi eksitona

Slika 5.2b prikazuje energetske nivoi eksitona čiji je centar masa u mirovanju. Optički prelazi sa vrha valentne zone su prikazani strelicama, najduža odgovara ionizaciji eksitona pa prema tome i energetskom procepu između granica provodne i valentne zone. Postoji kontinualan skup nivoa, pridruženih svakom od prikazanih eksitonkih nivoa, pošto centar masa eksitona može posedovati translacionu kinetičku energiju (svaki eksitonki nivo obrazuje jednu eksitonku zonu). Kod direktnih optičkih prelaza ukupna translaciona energija se ne menja osetnije, što znači da mogu postojati oštре eksitonke linije. Nula na skali energije je uzeta od vrha valentne zone.

Energija veze eksitona može se meriti na tri načina.

1. U optičkom prelazu iz valentne zone: iz razlike izmedju energije potrebne za kreaciju eksitona i energije kreacije slobodnog elektrona i slobodne šupljine (slika 5.3).
2. Iz luminescencije prilikom rekombinacije, uporedjivanjem energije potrebne za rekombinaciju para elektron - šupljina i energije eksitacione rekombinacije.
3. Fotoionizacijom eksitona kada nastaju slobodni nosioci. Ovaj eksperiment zahteva visoku koncentraciju eksitona.



Slika 5.3: Apsorpciona kriva za GaAs

Na slici 5.3 je zapažen uticaj eksitonskog nivoa na optičko apsorbovanje poluprovodnika, za energiju fotona blizu energetskog procepa E_g . Prikazana je granica optičkog apsorbovanja i eksitonski apsorpcioni maksimum kod GaAs, pri temperaturi 21 K po M.D.Sturgeu. Na vertikalnoj skali je koeficijent inteziteta apsorbovanja kao kod $I(x) = I_0 e^{-\alpha x}$. Energetski procep i eksitonska energija veze su dobijeni na osnovu apsorpcione krive: $E_g = 1.521$ eV, a eksitonska energija veze je 0.0034 eV.

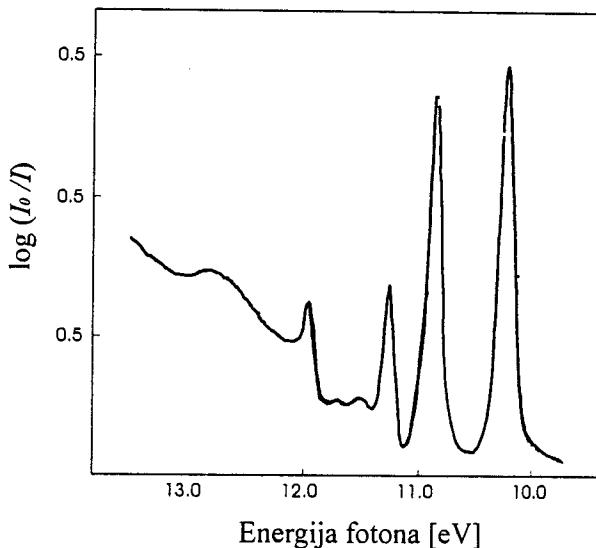
Ovde će biti razmatrane dve granične aproksimacije, jedna po Frenkelu, gde su eksitoni malog radijusa i čvrsto vezani, a druga po Vanije-Motu, gde su eksitoni slabo vezani i gde je udaljenost izmedju elektrona i šupljine velika u poređenju sa konstantom rešetke. U realnosti se javljaju mešana eksitonska stanja, ali u zavisnosti da li će sistem biti Frenkelov (kristal molekulskog tipa) ili Vanije-Motov (kristal poluprovodničkog tipa) odlučuje veličina koncentracije odgovarajućeg stanja [1,11].

5.1.1 Frenkelovi eksitoni

U čvrsto vezanom eksitonu (slika 5.1 b) 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 (slika 5.4). Energetski gap u kristalu iznosi 11.7 eV, tako da je energija osnovnog stanja elektrona $11.7 \text{ eV} - 10.17 \text{ eV} = 1.5 \text{ eV}$ i ona se raspodeljuje na slobodan elektron i slobodnu šupljinu odvojeno, kao i na ostatak kristala.



Slika 5.4: Apsorpciona kriva kristalnog kriptona na 20 K

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

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

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

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

Ova funkcija ima istu energiju kao i funkcija ϕ_l koja opisuje bilo koji drugi pobudjeni atom l . Međutim, 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:

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

gde je ϵ - ekscitaciona energija slobodnog atoma, T - interakcija koja meri ideo 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 :

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

Sredjivanjem desne strane sledi:

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

tako da se dobijaju svojstvena energetska stanja kao:

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

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

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

Alkalni halogenidi. U kristalu alkalnih halogenida eksitoni sa najnižom energijom su lokalizovani na negativnim halogenim jonima, što je prikazano na slici 5.1b, negativni joni imaju niže elektronske eksitacione nivoje nego pozitivni joni. Čisti kristali alkalnih halogenida su transparentni za vidljivu svetlost, što znači da energija eksitona ne leži u vidljivom delu spektra, ali kristali pokazuju znatnu eksitonsku apsorpcionu strukturu u vakuumskoj ultraljubičastoj oblasti spektra zračenja.

Dubletna struktura koja se delimično javlja u natrijum bromidu je slična strukturi najnižeg pobudjenog stanja atoma kriptona. Razdvajanje je uzrokovano spin-orbitalnom interakcijom. Ovakvi eksitoni su Frenkelovi eksitoni.

Molekulske kristale. U molekulskim kristalima kovalentna veza unutar molekula je mnogo jača od Van der Walsova veza između molekula, tako da se javljaju Frenkelovi eksitoni. Elektronska pobudjenja na individualnom molekulu se pojavljuju u kristalu kao eksitoni, često sa malim pomerajem u frekvenciji. Na niskim temperaturama linije u kristalu su relativno oštре, iako može biti više linijska struktura u kristalu nego u molekulu, zbog Davidovog cepanja. Davidov je pokazao da ako postoji σ molekula sa nedegenerisanim nivoima u elementarnoj celiji, svaka zona se cepe 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 [11].

5.1.2 Eksitoni Vanije-Mota

Posmatrajmo elektron u provodnoj zoni i šupljinu u valentnoj zoni. Elektron i šupljina se privlače Kulonovim potencijalom:

$$U(r) = -\frac{e^2}{\epsilon r} , \quad (5.9)$$

gde je r - udaljenost između čestica i ϵ - dielektrična permitivnost. (Polarizacija rešetke ne utiče na dielektričnu permitivnost ako je frekvencija kretanja eksitona veća od optičke fononske frekvencije). U ovom slučaju će postojati vezana stanja eksitonskih sistema sa totalnom energijom nižom od dna provodne zone. Ovaj problem se svodi na problem vodonikovog atoma ukoliko su energetske površi elektrona i šupljina sfere i energetski nivoi

nedegenerisani. Energetski nivoi vrha valentne zone dati su modifikovanom Ridbergovom jednačinom:

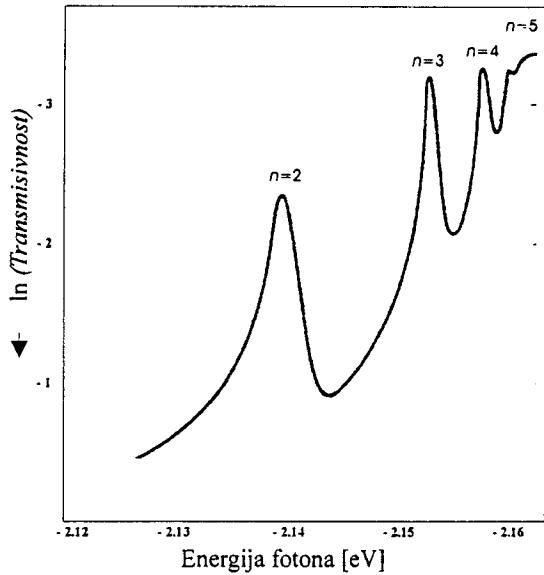
$$E_n = E_g - \frac{\mu e^4}{2\hbar^2 \epsilon^2 n^2}, \quad (5.10)$$

gde je n - glavni kvantni broj, a μ - redukovana masa:

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_s}, \quad (5.11)$$

gde su m_e i m_s efektivne mase elektrona i šupljina, respektivno.

Na slici 5.5 je prikazan logaritam optičke transmisivnosti u zavisnosti od energije fotona, kod bakar-oksida pri temperaturi 77 K; pokazan je niz eksitonskih linija. Na vertikalnoj osi logaritam je nanet tako da opada prema gore, tako da maksimum odgovara maloj transmisiji.



Slika 5.5: Transmisioni spektar eksitona

Stavljanjem $n = 1$ u jednačini (5.10) dobija se osnovno energetsko stanje eksitona, odnosno jonizaciona energija eksitona. Istraživanja linijskog spektra optičke apsorpcije Cu_2O , na niskim temperaturama, daju dobro slaganje sa Ridbergovom jednačinom (5.10), osim za prelaz na stanje $n = 1$. Empirijskim fitovanjem linija (slika 5.5) dobijena je relacija: $\nu [\text{cm}^{-1}] = 17.508 - (800/n^2)$, pri čemu je energetski gap $E_g = 2.17 \text{ eV}$.

5.2 Mikroteorija tenzora dielektrične permitivnosti

Tenzor dielektrične permitivnosti pojavljuje se u takozvanoj materijalnoj jednačini sredine, koja predstavlja dopunu Maksvelovim fenomenološkim jednačinama. Materijalna jednačina sredine daje vezu izmedju vektora električne indukcije $\vec{D}(\vec{r}, t)$ i vektora jačine električnog polja $\vec{E}(\vec{r}, t)$. Tenzor koji povezuje električnu indukciju sa poljem naziva se tenzorom dielektrične permitivnosti. U opštem slučaju ova veza ima oblik [6,12]:

$$D_\alpha(\vec{r}, t) = \int_{-\infty}^t dt' \int d^3\vec{r}' \tilde{\epsilon}_{\alpha\beta}(\vec{r} - \vec{r}'; t - t') E_\beta(\vec{r}', t') ; \quad \alpha, \beta \in (x, y, z) . \quad (5.12)$$

Ovde, a i u daljem tekstu, ponovljeni indeks zamenjuje oznaku sumiranja, tj. $\sum_j A_{ij} X_j \equiv A_{ij} X_j$. Veličine $\tilde{\epsilon}_{\alpha\beta}$ predstavljaju tenzor dielektrične permitivnosti. Materijalna jednačina (5.12) dobija mnogo prostiji oblik ako se izrazi u Furije komponentama veličina \vec{E} , \vec{D} i $\tilde{\epsilon}$.

Posle Furije-transformacija tipa:

$$\psi(\vec{r} - \vec{r}'; t - t') = \int d^3\vec{k} d\omega e^{i\vec{k}(\vec{r}-\vec{r}') - i\omega(t-t')} \psi(\vec{k}, \omega) \quad (5.13)$$

i primene poznate formule:

$$\int_{-\infty}^t dt' e^{it'(\omega' - \omega)} \rightarrow \int_{-\infty}^t dt' e^{it'(\omega' - \omega - i\delta)} = \frac{e^{it(\omega - \omega')}}{i(\omega' - \omega - i\delta)} , \quad \begin{matrix} \delta \rightarrow 0 & \delta \rightarrow +0 \end{matrix} \quad (5.14)$$

relacija (5.12) postaje:

$$D_\alpha(\vec{k}, \omega) = \epsilon_{\alpha\beta}(\vec{k}, \omega) E_\beta(\vec{k}, \omega) , \quad (5.15)$$

gde je:

$$\epsilon_{\alpha\beta}(\vec{k}, \omega) = (2\pi)^3 \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{\tilde{\epsilon}_{\alpha\beta}(\vec{k}, \omega')}{i(\omega' - \omega - i\delta)} ; \quad \delta \rightarrow +0 . \quad (5.16)$$

Dobijena relacija predstavlja materijalnu jednačinu sredine izraženu u Furije-komponentama električne indukcije, električnog polja i tenzora dielektrične permitivnosti.

Tenzor $\epsilon_{\alpha\beta}(\vec{k}, \omega)$ predstavlja karakteristiku sredine kroz koju se prostire elektromagnetno zračenje i bitno zavisi od njene unutrašnje dinamike i mikroprocesa koji se u njoj odigravaju. Otuda je razumljivo da se kao jedan od osnovnih zadataka teorije elektromagnetskog zračenja u materijalnim sredinama postavlja pitanje povezivanja tenzora dielektrične permitivnosti sa mikrokarakteristikama sredine kroz koju se prostire zračenje. Izgleda, u prvi mah, da se ovaj problem može lako rešiti. Statističke srednje vrednosti različitih operatora elektromagnetskog polja u sredini nisu ništa drugo do fenomenološke veličine ovih polja koje figurišu u Maksvelovim jednačinama. Zamena fenomenoloških veličina odgovarajućim srednjim vrednostima (u koje su preko statističkih operatora uključene mikrokarakteristike sredine) i pogodno kombinovanje Maksvelovih jednačina sa materijalnom jednačinom, pruža, bar u principu, mogućnost da se u izraz za tenzor $\epsilon_{\alpha\beta}(\vec{k}, \omega)$ ugrade i mikrodinamika i strukturne karakteristike sredine. Teškoće stvara činjenica da su operatori elektromagnetskog polja u sredini linearni funkcionali operatora koji kreiraju i anihiliraju pobudjenja ove sredine, pa su im zbog toga ravnotežne srednje

vrednosti ravne nuli. Prema tome, da bi se gornja ideja sprovela u delo, ne mogu se koristiti ravnotežne, već neravnotežne srednje vrednosti. Tada se odmah postavlja pitanje izbora spoljašnje perturbacije, izbora momenta njenog uključivanja i ostala mnogobrojna pitanja u vezi sa tačnošću aproksimacije u kojoj treba računati. Rešenje svih ovih pitanja predloženo je od strane Djalosinskog i Pitajevskog i njihov prilaz će biti izložen u daljem tekstu [6].

Zbog stalne prisutnosti slabih spoljašnjih struja najrealnije je da se kao spoljašnja perturbacija uzme interakcija elektromagnetskog polja sa spoljašnjim strujama, koja u slučaju diskretnе kristalne strukture ima oblik:

$$\hat{W}(t') = -\frac{1}{c} \sum_{\vec{n}'} \hat{A}_\beta(\vec{n}', t') j_\beta^{\text{ext}}(\vec{n}', t') , \quad (5.17)$$

gde su c - brzina svetlosti, \hat{A}_β - komponente neperturbovanog operatora vektorskog potencijala u kristalu i j^{ext} - slabe spoljašnje struje.

Operatori A dati su u reprezentaciji interakcije, tj.:

$$\hat{A}_\alpha(\vec{n}, t) = \exp \left\{ -\frac{\hat{H}t}{i\hbar} \right\} \hat{A}_\alpha(\vec{n}) \exp \left\{ \frac{\hat{H}t}{i\hbar} \right\} , \quad (5.18)$$

gde je:

$$\hat{H} = \Delta \sum_{\vec{n}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}} + \sum_{\vec{n}, \vec{m}} X_{\vec{n}, \vec{m}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}} + \sum_{\vec{n}, \vec{m}} Y_{\vec{n}, \vec{m}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}} P_{\vec{m}}^+ P_{\vec{m}} \quad (5.19)$$

operator energije kristala izraženi preko Pauli-operatora P^+ i P , kreacije i anihilacije elementarnih pobudjenja u kristalu. Kao što iz predjašnjeg vidi hamiltonijan tipa (5.19) odgovara eksitonskom sistemu za slučaj dvonivovske šeme molekularnih pobudjenja ili sistema feroelektričnih pobudjenja u feroelektricima tipa KDP.

Neravnotežna srednja vrednost operatora u polju (5.12), koju ćemo označiti simbolom $\langle \dots \rangle_t$ izračunava se po formuli:

$$\langle \hat{A}_\alpha(\vec{n}, t) \rangle_t = \langle \hat{S}^{-1}(t) \hat{A}_\alpha(\vec{n}, t) \hat{S}(t) \rangle_0 . \quad (5.20)$$

gde je S matrica data izrazom:

$$\hat{S}(t) = \hat{T} \exp \left\{ \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \hat{W}(t') \right\} , \quad (5.21)$$

pri čemu je T - dajsonov hronološki operator. Simbol $\langle \dots \rangle_0$ iz (5.20) označava usrednjavanje po ravnotežnom statističkom operatoru kanoničkog ansambla:

$$\hat{\rho}_0 = \exp \left\{ \frac{F - \hat{H}}{\theta} \right\} , \quad (5.22)$$

gde je F - slobodna energija kristala i $\theta = k_B T$ - temperatura u energetskim jedinicama.

Pošto je $A_\alpha(\vec{n}, t)$, kao jednočestični operator, čiji su dijagonalni elementi jednaki nuli, linearan po $P_{\vec{n}}$ i $P_{\vec{n}}^+$, jasno je da je i njegova ravnotežna srednja vrednost $\langle \hat{A}_\alpha(\vec{n}, t) \rangle_0$

takodje jenaka nuli. Ako ovo uzmemu u obzir i srednju vrednost (5.20) sračunamo u aproksimaciji linearnej po spoljašnjem polju $\hat{W}(t')$, dobijamo:

$$\langle \hat{A}_\alpha(\vec{n}, t) \rangle_t = \frac{i}{\hbar c} \sum_{\vec{n}'} \int_{-\infty}^t dt' \Phi_{\alpha\beta}(\vec{n} - \vec{n}'; t - t') j^{\text{ext}}(\vec{n}', t') , \quad (5.23)$$

gde je:

$$\Phi_{\alpha\beta}(\vec{n} - \vec{n}'; t - t') = \Theta(t - t') \langle \hat{A}_\alpha(\vec{n}, t) \hat{A}_\beta(\vec{n}', t') - \hat{A}_\beta(\vec{n}', t') \hat{A}_\alpha(\vec{n}, t) \rangle_0 , \quad (5.24)$$

dok je Hevisajdova step funkcija definisana kao:

$$\Theta(t - t') = \begin{cases} 1 & t > t' \\ 0 & t < t' \end{cases}$$

Posle Furije-transformacija tipa (5.13) Grinove funkcije elektromagnetskog polja u kristolalu $\left(\int d^3 \vec{k} e^{i\vec{k}(\vec{r} - \vec{r}')} \rightarrow \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{n} - \vec{n}')} \right)$, uz prepostavku da je funkcija $\Phi_{\alpha\beta}(\vec{k}, \omega)$ analitička u gornjoj poluravni kompleksne promenljive ω , relacija (5.20) postaje:

$$\langle \hat{A}_\alpha(\vec{k}, \omega) \rangle_t = \frac{i\pi}{\hbar c} \Phi_{\alpha\beta}(\vec{k}, \omega) j_\beta^{\text{ext}}(\vec{k}, \omega) . \quad (5.25)$$

Pošto vektorski potencijal predstavlja gradijentno neinvarijantnu veličinu (definisan je do na gradijent neke skalarne funkcije), Grinova funkcija $\Phi_{\alpha\beta}(\vec{n} - \vec{n}'; t - t')$ u kojoj figurišu komponente vektorskog potencijala, takodje predstavlja gradijentno neinvarijantnu veličinu. Na osnovu relacije:

$$\hat{\vec{E}}(\vec{n}, t) = -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \hat{A}(\vec{n}, t) \quad (5.26)$$

funkcija $\Phi_{\alpha\beta}$ se može izraziti preko komponenata električnog polja, tj. preko Grinove funkcije oblika:

$$\Lambda_{\alpha\beta}(\vec{n} - \vec{n}'; t - t') = \Theta(t - t') \langle \hat{E}_\alpha(\vec{n}, t) \hat{E}_\beta(\vec{n}', t') - \hat{E}_\beta(\vec{n}', t') \hat{E}_\alpha(\vec{n}, t) \rangle_0 , \quad (5.27)$$

koja predstavlja gradijentno invarijantnu karakteristiku sistema. Ako se na funkciju $\Phi_{\alpha\beta}(\vec{n} - \vec{n}'; t - t')$ primeni operator $\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}$ dobija se:

$$\begin{aligned} - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \Phi_{\alpha\beta}(\vec{n} - \vec{n}'; t - t') &= \delta(t - t') \langle \hat{A}_\alpha(\vec{n}, t) \hat{A}_\beta(\vec{n}', t) - \hat{A}_\beta(\vec{n}', t) \hat{A}_\alpha(\vec{n}, t) \rangle_0 + \\ + \Theta(t - t') \langle \hat{E}_\alpha(\vec{n}, t) \hat{A}_\beta(\vec{n}', t') - \hat{A}_\beta(\vec{n}', t') \hat{E}_\alpha(\vec{n}, t) \rangle_0 &= \\ = \Theta(t - t') \langle \hat{E}_\alpha(\vec{n}, t) \hat{A}_\beta(\vec{n}', t') - \hat{A}_\beta(\vec{n}', t') \hat{E}_\alpha(\vec{n}, t) \rangle_0 & \end{aligned} \quad (5.28)$$

pri čemu završni stav sledi na osnovu činjenice da operatori komponenata vektorskog potencijala komutiraju, kada deluju u istom trenutku vremena. Primena operatora $\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}$, na gornju jednačinu daje rezultat:

$$\begin{aligned} \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t' \partial t} \Phi_{\alpha\beta}(\vec{n} - \vec{n}'; t - t') &= \frac{1}{c} \delta(t - t') \langle \hat{E}_\alpha(\vec{n}, t) \hat{A}_\beta(\vec{n}', t) - \\ - \hat{A}_\beta(\vec{n}', t) \hat{E}_\alpha(\vec{n}, t) \rangle_0 + \Lambda_{\alpha\beta}(\vec{n} - \vec{n}'; t - t') . \end{aligned} \quad (5.29)$$

Prvi član u dobijenoj relaciji iznosi:

$$\langle \hat{E}_\alpha(\vec{n}, t) \hat{A}_\beta(\vec{n}', t) - \hat{A}_\beta(\vec{n}', t) \hat{E}_\alpha(\vec{n}, t) \rangle_0 = \delta_{\alpha\beta} \delta_{\vec{n}\vec{n}'} 8\pi i \hbar c, \quad (5.30)$$

pa je konačno:

$$\frac{\partial^2}{\partial t' \partial t} \Phi_{\alpha\beta}(\vec{n} - \vec{n}'; t - t') = \delta_{\alpha\beta} \delta_{\vec{n}\vec{n}'} \delta(t - t') 8\pi i \hbar c^2 + c^2 \Lambda_{\alpha\beta}(\vec{n} - \vec{n}'; t - t'). \quad (5.31)$$

Posle Furije-transformacija gornja relacija se svodi na:

$$\Phi_{\alpha\beta}(\vec{k}, \omega) = 4i\hbar \frac{c^2}{\omega^2} \delta_{\alpha\beta} + \frac{c^2}{\omega^2} \Lambda_{\alpha\beta}(\vec{k}, \omega). \quad (5.32)$$

Kombinovanjem (5.32) i (5.25) dobija se srednja vrednost $\langle A_\alpha(\vec{k}, \omega) \rangle_t$, ovoga puta izražena preko gradijentno invarijante funkcije $\Lambda_{\alpha\beta}(\vec{k}, \omega)$:

$$\langle \hat{A}_\alpha(\vec{k}, \omega) \rangle_t = \left[-\frac{4\pi c}{\omega^2} \delta_{\alpha\beta} + \frac{i\pi c}{\hbar\omega^2} \Lambda_{\alpha\beta}(\vec{k}, \omega) \right] j_\beta^{\text{ext}}(\vec{k}, \omega). \quad (5.33)$$

U rezultatu do koga se došlo još uvek eksplisitno ne figurišu mikrokarakteristike kristala. Pošto su u ove karakteristike uključene Grinove funkcije komponovane od operatora P^+ i P koji kreiraju i anihiliraju elementarna pobudjena u kristalu, u račun moramo uvesti ovakve Grinove funkcije.

Pošto je operator jačine električnog polja u kristalu $\hat{E}_\alpha(\vec{n}, t)$ jednočestični operator, čiji su dijagonalni matrični elementi ravnici nuli, možemo pisati:

$$\hat{E}_\alpha(\vec{n}, t) = \hat{\tau}_0^{1/2} \left[\langle 0 | E_\alpha | f \rangle P_{\vec{n}}(t) + \langle f | E_\alpha | 0 \rangle P_{\vec{n}}^+(t) \right], \quad (5.34)$$

gde su $\langle 0 | E_\alpha | f \rangle$ i $\langle f | E_\alpha | 0 \rangle$ momenti prelaza iz osnovnog stanja 0 u pobudjeno stanje f pod dejstvom komponente električnog polja E_α u elementarnoj celiji kristala i τ_0 -zapremina elementarne celije kristala.

Zamenom (5.34) u (5.27) dobijamo:

$$\Lambda_{\alpha\beta}(\vec{n} - \vec{n}'; t - t') = \tau_0 \langle 0 | E_\alpha | f \rangle \langle f | E_\beta | 0 \rangle \left[\Gamma(\vec{n} - \vec{n}'; t - t') + \tilde{\Gamma}(\vec{n} - \vec{n}'; t - t') \right] \quad (5.35)$$

$$\langle 0 | E_\alpha | f \rangle \langle f | E_\beta | 0 \rangle = \langle f | E_\alpha | 0 \rangle \langle 0 | E_\beta | f \rangle,$$

gde su:

$$\Gamma(\vec{n} - \vec{n}'; t - t') = \Theta(t - t') \langle [P_{\vec{n}}(t), P_{\vec{n}'}^+(t')] \rangle \equiv \langle \langle P_{\vec{n}}(t) | P_{\vec{n}'}^+(t') \rangle \rangle \quad (5.36)$$

i

$$\tilde{\Gamma}(\vec{n} - \vec{n}'; t - t') = \Theta(t - t') \langle [P_{\vec{n}}^+(t'), P_{\vec{n}}(t)] \rangle \equiv \langle \langle P_{\vec{n}}^+(t') | P_{\vec{n}}(t) \rangle \rangle \quad (5.37)$$

retardovana i avansovana Grinova funkcija elementarnih pobudjena u kristalu, respektivno.

Iz (5.35) sledi:

$$\Lambda_{\alpha\beta}(\vec{k}, \omega) = \tau_0 \langle 0 | E_\alpha | f \rangle \langle f | E_\beta | 0 \rangle \left[\Gamma(\vec{k}, \omega) + \tilde{\Gamma}(\vec{k}, \omega) \right], \quad (5.38)$$

gde funkcije Γ i $\tilde{\Gamma}$ sadrže u sebi mikrokarakteristike kristala (zakon disperzije elementarnih pobudjena, srednje brojeve pobudjena, polarizacije itd.).

Zamenom (5.38) u (5.33) dolazimo do izraza:

$$\langle \hat{A}_\alpha(\vec{k}, \omega) \rangle_t = \left\{ -\frac{4\pi c}{\omega^2} \delta_{\alpha\beta} + \frac{i\pi c \tau_0}{\hbar \omega^2} \langle 0 | E_\alpha | f \rangle \langle f | E_\beta | 0 \rangle [\Gamma(\vec{k}, \omega) + \tilde{\Gamma}(\vec{k}, \omega)] \right\} j_\beta^{\text{ext}}(\vec{k}, \omega) \quad (5.39)$$

u kome je neravnotežna srednja vrednost operatora vektorskog potencijala u kristalu izražena preko funkcija $\Gamma(\vec{k}, \omega)$ i $\tilde{\Gamma}(\vec{k}, \omega)$ u koje su uključene mikrokarakteristike kristala.

S obzirom na raniju diskusiju (neravnotežne srednje vrednosti operatora su isto što i odgovarajuće fenomenološke karakteristike) možemo pisati:

$$A_\alpha(\vec{k}, \omega) = \langle \hat{A}_\alpha(\vec{k}, \omega) \rangle_t \quad (5.40)$$

gde $A_\alpha(\vec{k}, \omega)$ predstavlja Furije-komponentu vektorskog potencijala koja figuriše u fenomenološkim Maksvelovim jednačinama i može se izraziti preko tenzora dielektrične permittivnosti $\varepsilon_{\alpha\beta}(\vec{k}, \omega)$.

Da bismo našli vezu izmedju A i ε startovaćemo od Maksvelovih jednačina za slučaj kada je gustina spoljašnjih nanelektrisanja $\rho^{\text{ext}}(\vec{r}, t)$ ravna nuli. Potreban par Maksvelovih jednačina je:

$$\begin{aligned} \text{rot } \vec{B}(\vec{r}, t) &= \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{D}(\vec{r}, t)}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} \vec{j}^{\text{ext}}(\vec{r}, t) \\ \text{rot } \vec{E}(\vec{r}, t) &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}(\vec{r}, t)}{\partial t} \end{aligned} \quad (5.41)$$

Ako se ovim jednačinama dodaju jednačine (5.12) i (5.26), posle Furije transformacija tipa (5.13), dobijamo:

$$\begin{aligned} \vec{k} \times \vec{B}(\vec{k}, \omega) &= -\frac{\omega}{c} \vec{D}(\vec{k}, \omega) + \frac{4\pi}{ic} \vec{j}^{\text{ext}}(\vec{k}, \omega) \\ \vec{k} \times \vec{E}(\vec{k}, \omega) &= \frac{\omega}{c} \vec{B}(\vec{k}, \omega) \\ \vec{E}(\vec{k}, \omega) &= \frac{i\omega}{c} \vec{A}(\vec{k}, \omega) \\ D_\alpha(\vec{k}, \omega) &= \varepsilon_{\alpha\beta}(\vec{k}, \omega) E_\beta(\vec{k}, \omega) \end{aligned} \quad (5.42)$$

Kombinujući jednačine sistema (5.42) dolazimo do rezultata

$$A_\alpha(\vec{k}, \omega) = \frac{4\pi}{c} \Delta_{\alpha\beta}^{-1}(\vec{k}, \omega) \vec{j}^{\text{ext}}(\vec{k}, \omega) \quad (5.43)$$

gde je:

$$\Delta_{\alpha\beta}(\vec{k}, \omega) = k^2 \delta_{\alpha\beta} - k_\alpha k_\beta - \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_{\alpha\beta}(\vec{k}, \omega) \quad (5.44)$$

Tenzor $\Delta_{\alpha\beta}^{-1}$ je inverzan tensoru $\Delta_{\alpha\beta}$.

Izjednačujući desne strane jednačina (5.39) i (5.43) dolazimo do relacije

$$\Delta_{\alpha\beta}^{-1}(\vec{k}, \omega) = -\frac{c^2}{\omega^2} \left\{ \delta_{\alpha\beta} - i \frac{\tau_0 \langle 0 | E_\alpha | f \rangle \langle f | E_\beta | 0 \rangle}{4\hbar} [\Gamma(\vec{k}, \omega) + \tilde{\Gamma}(\vec{k}, \omega)] \right\} \quad (5.45)$$

koja predstavlja traženu vezu izmedju dielektrične permitivnosti sistema (sadržana je u $\Delta_{\alpha\beta}^{-1}$) i mikrokarakteristike kristala, uključenih u Grinove funkcije $\Gamma(\vec{k}, \omega)$ i $\tilde{\Gamma}(\vec{k}, \omega)$.

Na kraju, potražićemo oblik veze (5.45) za slučaj kada se prostorna disperzija može zanemariti ($\vec{k} = 0$) i kada se koristi izotropna aproksimacija [12]:

$$\varepsilon_{\alpha\beta}(\vec{k}, \omega) \rightarrow \varepsilon_{\alpha\beta}(0, \omega) \rightarrow \varepsilon(\omega)\delta_{\alpha\beta} \quad (5.46)$$

$$\langle 0 | E_\alpha | f \rangle \langle f | E_\beta | 0 \rangle \rightarrow E_0^2 \delta_{\alpha\beta}$$

gde je E_0 jačina lokalnog električnog polja elementarne čelije kristala.

S obzirom na $\vec{k} = 0$ i $\varepsilon_{\alpha\beta} = \varepsilon\delta_{\alpha\beta}$ može se pisati:

$$\Delta_{\alpha\beta}(\vec{k}, \omega) \rightarrow \Delta_{\alpha\beta}(0, \omega) \rightarrow \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon(\omega) \delta_{\alpha\beta} \quad (5.47)$$

$$\Delta_{\alpha\beta}^{-1}(\vec{k}, \omega) \rightarrow \Delta_{\alpha\beta}^{-1}(0, \omega) \rightarrow \frac{c^2}{\omega^2} \varepsilon(\omega) \delta_{\alpha\beta}$$

Zamenom (5.46) i (5.47) u (5.45) dobijamo vezu izmedju dielektrične permitivnosti $\varepsilon(\omega)$ i Grinove funkcije Γ :

$$\varepsilon^{-1}(\omega) = 1 + \frac{E_0^2 \tau_0}{4i\hbar} [\Gamma(0, \omega) + \Gamma(0, -\omega)] \quad (5.48)$$

$$\Gamma(0, -\omega) = \tilde{\Gamma}(0, \omega)$$

Poslednja relacija važi, kao što smo već napomenuli, u izotropnoj aproksimaciji (5.46) i (5.47) i uz zanemarivanje prostorne disperzije.

6 Literatura

1. B.M.Агранович:
ТЕОРИЯ ЭКСИТОНОВ,
Наука, Москва 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. S.Lazarev, Ž.M.Škrbić, J.P.Šetrajčić,
D.Lj.Mirjanić and Lj.Ristovski,
J.Phys.Chem.Sol. 58, 793 (1997).
10. I.D.Vragović, S.M.Vučenović, J.P.Šetrajčić,
S.M.Stojković, D.Lj.Mirjanić i D.Raković:
OPTIČKE KARAKTERISTIKE DIELEKTRIČNIH FILMOVA,
2. Simpozijum industrijske elektronike (INDEL'98) - prihvaćeno 1998.
11. C.Kittel:
QUANTUM THEORY OF SOLIDS,
Wiley, New York 1963.
12. R.Djajić:
TEORIJSKA ANALIZA JEDNODIMENZIONIH STRUKTURA
I EFEKATA SPOLJAŠNJE STIMULACIJE,
Doktorska disertacija, PMF Sarajevo 1987.

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:
Siniša Vučenović, br.dos. 300/93
AU
- Mentor:
*Dr Jovan Šetrajčić,
redovni profesor, PMF, Novi Sad*
MN
- Naslov rada:
Eksitoni u dielektričnim filmovima
NR
- Jezik publikacije:
Srpski (latinica)
JP
- Jezik izvoda:
Srpski
JI
- Zemlja publikovanja:
Jugoslavija
ZP
- Uže geografsko područje:
Vojvodina
UGP
- Godina:
1998.
GO
- Izdavač:
Autorski reprint
IZ
- Mesto i adresa:
*Prirodno-matematički fakultet,
Trg Dositeja Obradovića 4, 21000 Novi Sad*
MA
- Fizički opis rada:
(6/35/12/1/4/9/1)
FO
- Naučna oblast:
Fizika
NO
- Naučna disciplina:
Fizika čvrstog stanja
ND
- Predmetna odrednica / ključne reči:
molekulski filmovi, eksiton, Grinove funkcije, spektri, permitivnost
PO
- Čuva se:
*Biblioteka Instituta za fiziku,
PMF Novi Sad*
- Izvod:
U radu je primjenjen metod dvovremenskih Grinovih funkcija za ispitivanje uticaja granica film-struktura na energetski spektar i moguća stanja eksitona. Nadjeni su izrazi za permitivnost molekulske kristala (balka i filma). Dobijeni rezultati predstavljeni su grafički i izvršene su analize, odnosno poređenja tih rezultata sa odgovarajućim u idealnim beskonacnim strukturama. Na osnovu toga uočene su najbitnije razlike između njih.
IZ
- Datum prihvatanja teme od strane Veća:
11.06.1998.
DP
- Datum odbrane:
16.09.1998.
DO
- Članovi komisije:
 - Predsednik:
*Dr Ljiljana Mašković,
vanr. profesor, PMF, Novi Sad*
 - Članovi:
*Dr Jovan Šetrajčić,
red. profesor, PMF, Novi Sad*
*Dr Dušan Lazar,
vanr. profesor, PMF, Novi Sad*KO