

UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET
DEPARTMAN ZA FIZIKU

– DOKTORSKA DISERTACIJA –

**OPTIČKE OSOBINE NANOKRISTALNIH
DIELEKTRIČNIH FILM-STRUKTURA**

M E N T O R

AKADEMIK PROF. DR JOVAN ŠETRAJČIĆ

K A N D I D A T

S V E T L A N A P E L E M I Š

Novi SAD , 2010. godine

Z a

Najtoplije se zahvaljujem svom mentoru akademiku prof. dr Jovanu Šetrajiću, kao i kolegi dr Siniši Vučenoviću na pomoći prilikom izbora teme i korisnim sugestijama u toku izrade ovoga rada.

Sadržaj

1	Uvod	4
2	Eksitoni u balku	9
2.1	Zakon disperzije	9
2.2	Distribucija eksitonskih stanja	13
2.3	Dielektrična permitivnost	14
2.4	Kramers-Kronigove disperzione relacije	15
2.5	Optičke karakteristike kristala	17
2.6	Merenje dielektričnih i optičkih karakteristika materijala	19
2.6.1	Merne tehnike	20
2.6.2	Realizovani merni sistem	24
3	Eksitoni u ultratankim kristalnim filmovima	27
3.1	Model molekuskog filma	27
3.2	Zakon disperzije	29
3.3	Kritične vrednosti i fazni prelazi	46
3.4	Spektralne težine eksitonskih stanja	50
3.5	Dielektrične i optičke osobine ultratankih filmova	67
3.6	Eksperimentalni rezultati	84
4	Zaključak	87
5	Dodatak	90
5.1	Eksitoni	90
5.1.1	Frenkelovi eksitoni	93
5.1.2	Eksitoni Vanije-Mota	95
5.2	Mikroteorija tenzora dielektrične permitivnosti	96
6	Literatura	101

1 Uvod

Nauka je u današnje vreme veoma zainteresovana za niskodimenzione sisteme, dimenzija reda i nekoliko nanometara, a koje u praktičnoj primeni pokazuju svoje izuzetne karakteristike [1–5] na raznim poljima (elektronika, optoelektronika, visokotemperaturna superprovodnost). Potrebu za minimizacijom dimenzija nametnulo je nekoliko međusobno zavisnih i isprepletenih zahteva današnje civilizacije, verovatno ključnih za njen dalji opstanak i održivi razvoj, a koji se okvirno mogu svesti na energetske i ekološki [6].

Napredak civilizacije kakvu danas poznajemo pratio je eksponencijalnu funkciju po vremenskoj promenljivoj, što nam potvrđuje i proteklih 100 godina, čiji je vremenski udeo naprema ukupnom vremenu postojanja ljudskog roda zanemarljiv, ali se u isti taj period može smestiti ukupni napredak. U međuvremenu, čovek je otkrivao fundamente, često na naivan, „dečiji” način, igrajući se poput Njutna kamenčićima ili zrcima saznanja u moru sveukupnog znanja [7]. Planeta Zemlja je postala mala, a čovek je nespretno doveo u opasnost i sopstveni ostanak na njoj. Poznavanje nauke o materijalima igra esencijalnu ulogu u daljem napretku i opstanku čovečanstva. Ona će umnogome odrediti naredna desetljeća, definišući pravce istraživanja u energetici i ekologiji.

Ljudski rod odavno koristi energetske resurse planete Zemlje, ali je napretkom „glad” za energijom postajala sve veća. Relativno lak i ugodan način je (bilo) iskorištavanje fosilnih izvora [6,7], čiji je jedan nezgodan popratni efekat ispuštanje u atmosferu ugljen-dioksida, sa katalitičkom posledicom globalnog zagrevanja, stvaranjem „efekta staklene bašte”. Druga činjenica koja prati fosilna goriva je konačnost njihovih izvora, a koja do izražaja dolazi u vreme dok nastaje ova disertacija, dovodeći ljudski rod u komplikovanu političko-ekonomsko-sociološku krizu.

Nauka poznaje mnoge alternative fosilnim gorivima. Jedna od njih je električna energija koju odavno koristimo komercijalno, no način skladištenja i čuvanja proizvedene električne energije još uvek predstavlja veliki problem. Jedan od mehanizama ovakvog skladištenja bio bi superprovodni kalem [8–10], no visokotemperaturni superprovodni materijali još uvek nisu niti dovoljno dobrih mehaničkih svojstava, niti naučno egzaktno objašnjeni. BCS teorija nedovoljno dobro objašnjava visokotemperaturnu superprovodnost, ostavljajući današnjoj nauci prostor za pronalaženje ovog mehanizma. Kako je kod pojedinih superprovodnih keramika otkrivena slojevita struktura [10–12], jedna od pretpostavki je da se na sobnim temperaturama dešavaju određeni procesi „po slojevima” koji dovode do pojave superprovodnosti. Ovakve slojevite strukture, reda veličina nekoliko (ili nekoliko desetina) atomskih slojeva daju realno opravdanje za dalje izučavanje upravo slojevitih struktura, tj. tankih filmova, ili sličnih struktura niskih dimenzija. Teorijsko izučavanje ponašanja elektrona, šupljina, eksitona, fonona..., treba voditi ka daljem razjašnjenju fenomena visokotemperaturske superprovodnosti, a time i davanjem smernica za pravljenje superprovodnih materijala.

Upravo zato je i nauka i tehnika u današnje vreme izuzetno zainteresovana za nisko ili kvantno-dimenzione sisteme, dakle dimenzije reda svega nekoliko nanometara, a koje pokazuju svoje izuzetne i veoma različite fundamentalne karakteristike. Analizom ponašanja elementarnih naelektrisanja (jona i elektrona) i njihovom aktivnom transferu kroz nanostrukture na mezoporoznim slojevima i uticaju graničnih uslova i vrste elektrolitičkog okruženja treba da se iznađe odgovor na pitanje šta sve to doprinosi efikasnoj difuziji naelektrisanja, a šta kviri ove pozitivne osobine.

Poznavanje karakteristika nanostrukture ne ograničava svoju primenu isključivo u svrhu objašnjavanja potencijalnog mehanizma superprovodnosti, već i za mnogo širu primenu u oblastima nanoelektronike, nanomedicine, nanomehanike ... Niskodimenzione strukture su u nanoelektronici komercijalno prisutne u oblastima energetike (tanki filmovi u solarnim ćelijama, gorive ćelije ili nanosima na savremenim litijum-jonskim baterijama i sl. [13–15]), telekomunikacija, računarske tehnike (*Thin Film Transistors* – TFT, Si-amorfni i polikristalni super-tanki filmovi, memorije ...), magnetne tehnike (nanomagneti uređaji, HDD mediji), senzorskoj tehnici (biosenzori i hibridni senzori), ili prosto kao zaštitne presvlake u hibridnim kolima [8]. Već smo ušli u eru nanomedicine, gde nanomaterijali počinju igrati esencijalnu ulogu u mnogim oblastima: nano-dimenzioni sistemi unošenja leka u organizam, sinetizovanje biomedicinskih nanomaterijala, nanomaterijali u terapijskoj i regenerativnoj medicini, imaging i dijagnostički nanomaterijali ... [16–18].

Pojava savremenih materijala i odgovarajućih proizvodnih postupaka bitno utiču na dešavanja u različitim oblastima tehnike, ali i na razvoj drugih područja ljudske delatnosti kao što su npr. medicina i energetika. Razvoj proizvodnih procesa i tržišno-konkurentnih proizvoda u velikoj meri je uslovljen poznavanjem strukture, osobina i ponašanja materijala. Sve analize pokazuju da industrijski najrazvijenije zemlje istraživanju primene savremenih materijala, posebno nano-struktura i odgovarajućih proizvodnih postupaka posvećuju naročito veliku pažnju. Tako nacionalna fondacija za nauku SAD predviđa da će do 2015. godine svetsko godišnje tržište roba i usluga vezanih za nanomaterijale i nanotehnologiju dostići jedan trilion američkih dolara [8], postavši tako jedna od industrija koja je najbrže rasla dosad u istoriji. Takođe, broj zaposlenih u oblasti nanomaterijala rapidno raste, te je projektovano da će dostići dva miliona radnika do 2015. godine.

Jedan od osnovnih faktora sadašnjih istraživanja materijala su pokušaji matematičkog modeliranja pojava na atomskom i molekulskom nivou i povezivanje strukture i željenih osobina materijala. Sada su već stvoreni [7] prvi proizvodi integracijom modeliranja prema teoriji „end to end”. U nekim slučajevima, nanostrukturni materijali, zbog njihove posebne morfologije, pokazuju neočekivano elektrohemijsko ponašanje. Nanostrukturni materijali doprinose stepenu povećanja provodnosti i efikasnosti jonskih baterija. Ispitivanje faktora koji uzrokuju promene osnovnih fizičkih osobina ultratankih prevlaka kod elektroda Li-jonskih baterija npr. je značajno, jer nanostrukturni materijali igraju važnu ulogu u Li-jonskim baterijama [14,15].

Ipak, u većini slučajeva, kada se nanostrukturni materijali koriste u Li-jonskim baterijama, smanjenje veličine do 10-20 nm samo dovodi do kraće dužine difuzije i veće površine Li inkorporiranog u čvrstu matricu. Na žalost, ova veća površina ne dovodi obavezno i do očekivanih rezultata. Naime, jednako važno ili čak i važnije je kako napraviti mikrostrukturu kompozita elektrode dostupnom za Li-jone. Ovaj problem se u principu može rešiti upotrebom mezoporoznih i makroporoznih aktivnih materijala sa debljinom zidova od oko 10–20 nm. Očekuje se da ovi materijali mogu rešiti jonski kontakt između aktivnih materijala i elektrolita. Jednaku pažnju treba posvetiti i u postizanju dobrog elektronskog provođenja. U celini, za funkcionisanje Li-jonskih baterija potrebno je paralelno provođenje elektronima i jonima, a za baterije velike snage ovakvo provođenje je i esencijalno. Predloženo je nekoliko nano-arhitektura specijalnog dizajna, ali je neophodan poseban dizajn potreban za dati materijal i takav dizajn nije moguće proširiti na druge tipove aktivnih materijala. Specifično kontrolisanim tehnološkim postupkom [15] mogu se načiniti nanostrukture na mezoporoznim slojevima (debljine 10–20 nm) koji će samo uticati na povećanje elementarnih naelektrisanja, a time i na ukupnu efikasnost jonskih baterija.

Veliki značaj nanotehnologija sve više dobija u ispitivanju i izučavanju bioloških sistema, pojedinačnih biomolekula. Radi se na konstrukciji bioloških nanostrukture, uređaja i sistema za dijagnostiku i terapiju, tkivni inženjering i regenerativnu medicinu, kao i na proizvodnji neinvazivnih in vivo nanoalata za imidžing i proučavanje patoloških procesa. Poseban značaj ima unošenje lekova jer se pomoću nanomaterijala postiže brža apsorpcija, kao i kontrola doza. Fluorescentni rezonantni energetski transfer (FRET) između donorskih i akceptorskih ćelija omogućava kvalitetnije informacije o rastojanju i kvantitativne informacije o kinetici i promena u rastojanju.

U narednim godinama očekuje se razvoj nanomedicine u mnogim oblastima [17–19]:

- stvaranje i korišćenje novih nanomaterijala i nanostrukture,
- biološke nanostrukture (veštački proizvodi za istraživanje i razumevanje bioloških sistema),
- analitičke metode i instrumenti za proučavanje pojedinačnih biomolekula,
- uređaji i nanosenzori za ranu dijagnostiku poremećaja i patogenosti,
- identifikacija novih bioloških meta, receptori, ligandi..za dijagnostiku i terapiju,
- konstrukcija multifunkcionalnih bioloških nanostrukture, uređaja i sistema za dijagnozu i kombinacija za terapiju i unošenje lekova,
- nanotehnologija za tkivni inženjering i regenerativnu medicinu,
- proizvodnja neinvazivnih nanoalata za posmatranje i proučavanje patoloških procesa,
- stimulatивно-senzitivni nanoalati ...

Biokompatibilni molekularni nanoslojevi su savremeni materijali od izuzetne važnosti i ogromne perspektivne primene u obnovljivim izvorima energije i nanomedicini, generalno, danas materijali spadaju u sam front svetskih istraživačkih trendova savremenih materijala. Analiza biokompatibilnih molekularnih nanoslojeva za izradu adekvatnih nano-kapsula kao nosača lekova, biočipova i nano-markera u budućoj nanomedicini takođe je važna u istraživanjima [19,20]. Nanomedicina se definiše kao monitoring, popravka, izgradnja i kontrola humanih bioloških sistema na molekularnom nivou, korištenjem konstantnih nano-uređaja i nanostrukture. Nanomedicina je globalni svetski istraživačko-tehnološki i poslovni poduhvat koji jednako uključuje sve kliničko-razvojne istraživačke institucije, visokoškolske ustanove, farmaceutske kompanije, pa do multinacionalnih korporacija. Trenutno, nanomedicina podrazumeva otkrivanje čestica; sisteme isporuke lekova, emulzije i nosače za isporuku vakcina i nanoproduktne biomaterijale sa neobičnim svojstvima jačine, tvrdoće, smanjene frikcije i povećane biokompatibilnosti. Egzotičniji koncepti kao što su nanomašine, koje bi se mogle kretati kroz telo, su stvar budućnosti. Prema navedenom izveštaju broj nanopatenata je nekoliko hiljada i oni su fokusirani na pet fundamentalnih nanomaterijala: nanoslojevi, kvantne tačke i žice, fulereni, dendrimeri i ugljenikove nanožice.

Nanomedicina je još uvek zaokupljena mnogim fundamentalnim pitanjima, ali bez obzira na to, prepoznatljive su koristi u području materijala koji mogu delovati kao nosači za medikamente i markere za vizuelizaciju karcinoma i drugih lezija. Usmereni transfer lekova na specifična mesta su samo neki od konceptata koji su na frontu svetskih istraživanja. Za navedene strukture prilikom analiziranja određuju se topografske karakteristike, gde se na osnovu toga proračunavaju fraktalne dimenzije koje su reda nm, a za te iste površi se određuje gradijent magnetnog polja koji definiše dijamagnetne, paramagnetne i feromagnetne osobine materijala i distribuciju atoma u tom materijalu.

Na osnovu stečenog iskustva u istraživanju nanostrukture (ultratanki filmovi, superrešetke, kvantne žice i kvantne tačke) [21–23] može se formulirati model biokompatibilnosti molekularnih nanoslojeva koji će služiti za inkapsulaciju lekova, biočipova i biomarkera. U specifičnim uslovima, a prema zahtevu upotrebe možemo istražiti uslove neophodne za kontrolisani dezintegraciju strukture kapsule. Sva ova predviđanja zasnivaju se na činjenici da nanoslojne kapsule imaju drugačija fizička svojstva, npr. bolju električnu provodnost, diskretnu selektivnu optičku emisiju, odnosno apsorpciju i drugačija mehanička svojstva koja uključuju i bioporoznost.

Cilj multidisciplinarnih istraživanja kod biokompatibilnih molekularnih nanomaterijala je da se iznađu parametri i mogućnosti za konstrukciju graničnih površina koje će u interakciji sa biološkim okruženjem kreirati takve osobine nanoslojeva pogodnih za upotrebu za slojeve kapsula nosača lekova, biočipova i biomarkera. Ti slojevi treba da imaju kontrolisanu dezintegraciju strukture, bolju električnu provodnost, diskretnu selektivnu luminescenciju i odgovarajuću bioporoznost jer su to sve zahtevi savremene nanomedicine.

Nanotehnologija je otvorena i u neprekidnoj potrazi za novim metodama i novim mogućnostima upotrebe nanostrukture u svim potencijalno upotrebljivim granama. U tom smislu je rođena i tematska ideja ove disertacije, koja će tražiti na koji način će se ponašati nisko-dimenzionalne strukture, tanki filmovi, ukoliko se nađu u spoljašnjem elektromagnetnom polju. Istraživanja će se bazirati na molekularnim kristalima, koji su elektro-neprovodni (dielektrici), izračunavaće se dielektrična permitivnost slojevitih struktura – fizička veličina koja je direktno korelirana sa indeksom prelamanja, tj. sa karakterističnom makroskopskom optičkom fizičkom veličinom.

Za razliku od masivnih kristalnih struktura, kod ultra-tankih kristalnih struktura, sačinjenih od jednake vrste materijala, očekuju se izraziti kvantni efekti. Sledeća važna činjenica koja će se pratiti u disertaciji je način na koji će ultra-tanke strukture reagovati na donju površ – supstrat (materijal na kojem se ultra-tanki film nalazi – najčešće nanešena nekom od metoda naparavanja), kao i na sredinu koja se nalazi na gornjoj površini ultra-tanke strukture. Pokazaće se korelacija između veoma malih dimenzija i granica ovih sistema i kvantnih efekata koji se javljaju u njima na makroskopskom nivou, i biće istražene dielektrične i optičke osobine ultra-tankoslojnih molekularnih kristala (ultra-tankih filmova) u okviru modela eksitona Frenkelovog tipa. Direktna veza između dimenzija materijala i uticaja graničnih uslova na njihove optičke veličine, može otvoriti eventualne nove ideje o iskoristivosti ovih materijala bilo kao nano-filtera, ili svojevrsnih optičkih ultra-finih senzora.

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 [24–29]. Proučavanje ponašanja eksitona u kristalnim sistemima kulminiralo je otkrićem lasera. Poslednjih desetak ili najviše petanestak godina veoma su intenzivirana teorijska istraživanja kvazidvodimenzionalnih eksitonskih sistema (nanostrukture), naročito ultratankih filmova,¹ ne samo zbog dobijanja fundamentalnih informacija o dielektričnim osobinama materijala već i zbog njihove široke praktične primene (nanoelektronika i optoelektronika) [30–33]. Posebnost ovih struktura ogleda se 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 uzorka [34–36].

U ovoj disertaciji istražen je uticaj prisustva granica ultratanke kristalne film-strukture na energetske spektar eksitona (eksitonski zakon disperzije). Posebna pažnja posvećena je pojavi i prostornoj distribuciji lokalizovanih eksitonskih stanja. Takođe su ispitane optičke osobine ovih dielektričnih filmova (određena je njihova dielektrična permitivnost, te indeksi prela-

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.

manja i apsorpcije). Dobijeni rezultati poređeni su sa odgovarajućim rezultatima za idealne, tj. neograničene (u stručnoj literaturi: *balk*) uzorke iste kristalne strukture, da bi se na osnovu toga uočile najbitnije razlike ova dva sistema i šta to dovodi do promena fundamentalnih fizičkih karakteristika ovih kvantnih struktura.

U sprovedenom teorijskom radu veoma ozbiljno se pristupilo ispitivanju uticaja kako postojanja dveju paralelnih graničnih površi (konačne i kvantno male debljine kristalnog molekuskog filma), tako i prisustva izmenjenih graničnih parametara na tim graničnim površima i u sloju između njih i njima prvih susednih kristalnih ravni unutar posmatrane film-strukture.

Radi izdvajanja uticaja postojanja granica i izmenjenih graničnih uslova u graničnim slojevima, kristalografski podaci u svim posmatranim strukturama su uzimani sa istim vrednostima, a uglavnom u svim rezultatima su relevantne fizičke veličine izražavane u bezdimenzionoj formi, podjednako odgovarajućoj za sve posmatrane kristalne strukture.

Pomenute analize vršena su korišćenjem metoda dvovremenskih temperaturno zavisnih Grinovih funkcija koji se danas veoma često koristi u kvantnoj teoriji čvrstog stanja [37–40]. Zahvaljujući adekvatno ugrađenoj statistici, taj metod se uspešno primenjuje kod izračunavanja kako mikroskopskih tako i makroskopskih, ravnotežnih i neravnotežnih svojstava kristala [20–22]. Ovaj metod je odabran zbog pogodnosti koje nam nudi definicija polova Grinovih funkcija.²

Na početku ove disertacije (u drugoj glavi) ukratko je data teorija optičkih pobuđenja (eksitona) u molekuskim kristalima. Formiran je efektivni bozonski hamiltonijan u harmonijskoj i aproksimaciji najbližih suseda. Metodom Grinovih funkcija određen zakon disperzije i prikazana prostorna distribucija eksitonskih stanja. Linearnim odzivom na perturbaciju sistema spoljašnjim elektro-magnetnim poljem iznađena je dinamička permitivnost sistema, a uz pomoć Kramersovih i Maksvelovih relacija – i dve osnovne optičke karakteristike: dinamički indeksi prelamanja i apsorpcije³. U ovom delu naglašene su odgovarajuće zone (energetska, dielektrična i apsorpciona) sa kontinualno promenljivim specifičnim veličinama koje karakterišu balk-strukturu. Ovaj deo se završava pregledom savremenih metoda, instrumenata i tehničko-tehnološke opreme za merenje dielektričnih i optičkih svojstava materijala.

Treća glava disertacije predstavlja rezultate teorijskih istraživanja promena fundamentalnih osobina ultratankih molekuskih kristala u odnosu na balk-strukture iste hemijske građe. Analizom istovetnog eksitonskog modela, ali prostorno jako ograničenog duž jednog prostornog pravca okomitog na dve paralelne granične površi sa promenljivim (perturbacionim) parametrima, primenom prilagođenog metoda Grinovih funkcija, određene su, prvo, mikroskopske osobine ultratankih eksitonskih filmova: mogući energetske nivoi i stanja. Na analogan metodološki način kao i kod balka, određene su dinamičke dielektrične i optičke karakteristike posmatranog ograničenog sistema: permitivnost, te indeksi prelamanja i apsorpcije u zavisnosti od frekvencije spoljašnjeg elektro-magnetnog polja. Posebno su ispitani uticaji svih (pet) graničnih parametara na pojavu lokalizovanih eksitonskih stanja, kao i na njihovu povezanost sa efektima diskretizacije i selekcije rezonantne apsorpcije prisutnog elektromagnetnog zračenja. Ova glava se završava komparacijom ovih i savremenih eksperimentalnih podataka iz ove oblasti.

Posle zaključnog dela gde su navedeni najznačajniji rezultati sprovedenih istraživanja, a pre spiska korišćene literature, na kraju ove disertacije dati su dodaci iz opšte teorije eksitona u molekuskim kristalima i iz mikroskopske teorije linearnog odziva sistema na promenljivu eksternu pobudu.

²Realni delovi polova Grinovih funkcija definišu energije elementarnih ekscitacija (pobuđenja) koje se javljaju u sistemu (odakle se dobija njihov zakon disperzije), dok su imaginarni delovi proporcionalni recipročnim vrednostima vremena života tih ekscitacija.

³U široj literaturi ova fizička veličina češće se naziva koeficijent apsorpcije, no ovde je prihvaćen izraz: indeks apsorpcije, jer se radi o bezdimenzionoj, ali dinamičkoj promenljivoj veličini koja zavisi od frekvencije spoljašnjeg elektro-magnetnog polja.

2 Eksitoni u balku

Razmatramo svojstva eksitonskog podsistema idealnog beskonačnog kubnog kristala polazeći od standardnog eksitonskog hamiltonijana koji u konfiguracionom prostoru ima oblik [24–27]:

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

gde su $P_{\vec{n}}^+$ i $P_{\vec{n}}$ kreacioni i anihilacioni operatori eksitona na čvoru \vec{n} kristalne rešetke. Veličina $\Delta_{\vec{n}}$ predstavlja energiju eksitona lokalizovanog na čvoru \vec{n} , a veličine $X_{\vec{n}, \vec{m}}$ i $Y_{\vec{n}, \vec{m}}$ su matricni elementi eksitonskog transfera sa čvora \vec{n} na čvor \vec{m} [41–43].

2.1 Zakon disperzije

Svojstva posmatranog eksitonskog sistema analiziraćemo pomoću komutatorske paulionske Grinove funkcije [37–40]:

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

koja zadovoljava jednačinu kretanja [24,26]:

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

Korišćenjem komutatorskih relacija za Pauli-operatore [44,46]:

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

dobijamo:

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

gde su:

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

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

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

Na osnovu toga računamo:

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

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

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

Osnovnu teškoću teorije eksitona predstavlja činjenica da Pauli-operatori P^+ i P nisu ni Boze ni Fermi operatori, nego određen 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 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 [44–46]:

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

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

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

Na taj način dobijamo:

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

Dekuplovanjem viših Grinovih funkcija pomoću poznatih Boze-komutacionih relacija:

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

članovi u izrazu (2.10) postaju:

– prvi član

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

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

– drugi član

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

gde \mathcal{N}_0 predstavlja koncentraciju eksitona:

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

– treći član

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

– četvrti član

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Gornju jednačinu ćemo rešavati u najnižoj aproksimaciji:

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

takođe je:

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

i proizvodi Grinovih funkcija:

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

„Dekuplovana” jednačina je tada:

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

Ako se izvrše vremenske Furije-transformacije tipa:

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

nakon toga se dobija:

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

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:

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

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

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

Sređivanjem gornje jednačine dobijamo:

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

Iz ove jednačine možemo izraziti Grinovu funkciju:

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

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

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

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

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

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

Ovaj zakon disperzije prikazan je na (slika 2.1), u stručnoj literaturi [33–35], uobičajen način:

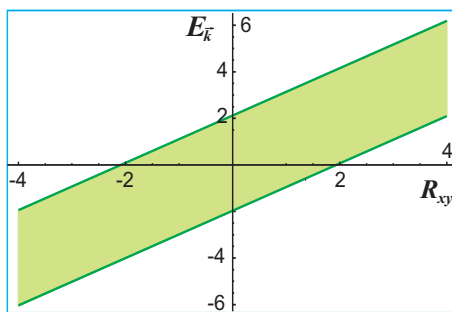
$$\mathcal{E}_{\vec{k}} = \mathcal{E}_z(\mathcal{F}_{xy}),$$

dakle u funkciji dvodimenzione (xy) veličine \mathcal{F} .

Vidi se da za $ak_i \in [0, +\pi]$, $i = x, y, z$ (prva Brillouinova zona), ove veličine leže u intervalima:

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

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



Slika 2.1: Zakon disperzije eksitona u molekulsom kristalu

Uočljivo je postojanje zone dozvoljenih (kontinualnih) energetske nivoa.

2.2 Distribucija eksitonskih stanja

Unutar zone dozvoljenih energija (slika 2.1) ima onoliko mogućih energija (energetskih stanja) koliko i elementarnih čestica koje čine kristalnu rešetku. U kubnom kristalnom uzorku zapremine 1 cm^3 nalazi se $10^8 \times 10^8 \times 10^8 = 10^{24}$ atoma/molekula, pa je i broj mogućih energije jednak 10^{24} . Sve te energije su jednako-verovatne i njihova prostorna distribucija u kristalu je ravno-pravna: na svakom čvoru sve energije su moguće i javljaju se sa istom (međusobom jednakom) verovatnoćom.

2.3 Dielektrična permitivnost

Dielektrična permitivnost data je izrazom [24–29,33–35,46–48]:

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

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:

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

Izraz (2.28), uz $a_x = a_y = a_z \equiv a$, možemo napisati u obliku:

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

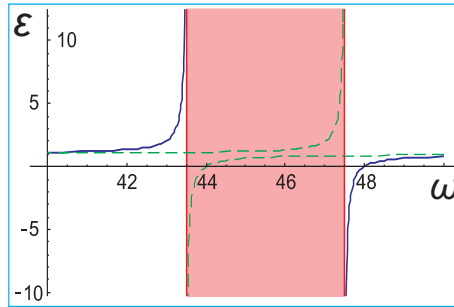
gde je:

$$E_{\vec{k}}^- = \Delta - 2|X| (\cos ak_x + \cos ak_y + \cos ak_z). \quad (2.34)$$

Zamenom (2.33) sa (2.34) u (2.32) dobija se izraz za dinamičku permitivnost u balku molekuskog kristala u sledećoj formi:

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

Zavisnost permitivnosti (2.35) od redukovane frekvencije (bezdimeziona veličina: $\hbar\omega/\Delta$) spoljašnjeg elektromagnetnog polja prikazana je na slici 2.2.



Slika 2.2: Permitivnost molekuskog kristala

Vidljivo je postojanje jedne apsorpcione zone unutar određenih graničnih frekvencija. Ova energetska zona je računata za dvodimenzioni centar Brillouene zone ($k_x = k_y = 0$; $k_z = [0, \pi]$). Za sve ostale energije taj kristal je transparentan i nema nikakvih prostornih nehomogenosti.⁴

⁴Za prostorno ograničene sisteme, npr. filmove – nastaje narušenje ovakve izotropije i kristalni film pokazuje različite optičke osobine na različitim slojevima; detalje videti u glavi 3.

2.4 Kramers-Kronigove disperzione relacije

Za optički izotropnu sredinu (npr. balk-kristal proste kubne strukture) u statičkom ili sporo promenljivom elektromagnetnom polju vektor električne indukcije ima oblik [24–28]:

$$\vec{D} = \varepsilon \vec{E} = \vec{E} + 4\pi \vec{P}, \quad (2.36)$$

gde je \vec{E} – vektor usrednjene jačine električnog polja u datoj sredini, \vec{P} – vektor polarizacije, a ε – dielektrična propustljivost (permitivnost) date sredine. Relacija (2.36) zasnovana je na pretpostavci o izotropnoj sredini, linearnoj vezi između \vec{D} i \vec{E} i lokalnosti i sinhronosti koji podrazumevaju da $\vec{D}(\vec{r}, t)$ zavisi od $\vec{E}(\vec{r}, t)$ samo u datoj tački prostora i u datom vremenskom trenutku. Ukoliko veza između $\vec{D}(\vec{r}, t)$ i $\vec{E}(\vec{r}, t)$ nije lokalnog i sinhronog karaktera, govori se o *prostornoj i vremenskoj disperziji* [29,49].

U brzo promenljivom elektromagnetnom polju kada je narušen uslov sinhronosti može se naći kako se menja veza između \vec{D} i \vec{E} i da li u tom slučaju može biti očuvan uslov lokalnosti uzajamnog dejstva, tj. može li u brzo promenljivom elektromagnetnom polju prostorna periodičnost biti mnogo veća od razmera atomske strukture rešetke.

Pod brzo promenljivim elektromagnetnim poljem podrazumeva se polje čija je frekvencija (ω) veća od frekvencije uspostavljanja polarizacije sredine ($\omega_P \approx \tau_P^{-1}$; gde je τ_P – vreme uspostavljanja polarizacije): $\omega > \omega_P$. Najveća frekvencija ω_P , povezana sa preraspodelom elektrona u atomu, po redu veličine jednaka je $\omega_P \approx v_a/a$, gde je v_a – brzina kretanja elektrona u atomu, a a – dimenzija atoma. Najveća talasna dužina elektromagnetnog polja koja odgovara $\omega = \omega_P$ iznosi $\lambda = c/\omega_P \approx ca/v_a \gg a$, pošto je brzina v_a barem dva reda veličine manja od brzine svetlosti c . Na taj način i u slučaju brzih elektromagnetnih polja sa frekvencijom $\omega \geq \omega_P$ talasna dužina još uvek može premašiti dimenzije atoma, što omogućava korišćenje makroskopskih jednačina elektrodinamike, tj. lokalnog opisivanja pojava.⁵

Pretpostavljajući da je veza između \vec{D} i \vec{E} oblika (2.36), tj. linearna, ali da je frekvencija elektromagnetnog polja toliko velika da je vrednost $\vec{D}(t)$ određena ne samo vrednošću $\vec{E}(t)$ u istom vremenskom trenutku, već i vrednostima $\vec{E}(t')$ u prethodnim trenucima ($-\infty < t' \leq t$), dobijamo:

$$\vec{D}(t) = \vec{E}(t) + \int_{-\infty}^t f(t-t') \vec{E}(t') dt'. \quad (2.37)$$

Ovde je $f(t)$ - funkcija koja zavisi samo od osobina sredine.⁶ Integral sa desne strane jednačine može se napisati u obliku:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(t-t') \vec{E}(t') dt'$$

ukoliko se načini dopunska pretpostavka da je $f(t-t') = 0$ pri $t' > t$. Ukoliko se pređe na Furije-reprezentaciju funkcija:

$$\vec{D}(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \vec{D}(\omega) e^{-i\omega t} d\omega; \quad \vec{E}(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \vec{E}(\omega) e^{-i\omega t} d\omega; \quad f(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} f(\omega) e^{-i\omega t} d\omega, \quad (2.38)$$

⁵Ova i sledeća razmatranja odnose se kako na dielektrike, tako i na poluprovodnike i metale.

⁶To što je vrednost $\vec{D}(t)$ određena vrednostima $\vec{E}(t')$ u prethodnim vremenskim trenucima u skladu je sa principom kauzalnosti (uzročnosti).

čiji su odgovarajući inverzni transformi:

$$\vec{D}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} \vec{D}(t) e^{i\omega t} dt; \quad \vec{E}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} \vec{E}(t) e^{i\omega t} dt; \quad f(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) e^{i\omega t} dt, \quad (2.39)$$

zamenjujući (2.38) u (2.37) dobijamo:⁷

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \{ \vec{D}(\omega) - [1 + f(\omega)] \vec{E}(\omega) \} e^{-i\omega t} d\omega = 0. \quad (2.40)$$

Kako ovaj integral mora biti jednak nuli za sve vrednosti t , sledi:

$$\vec{D}(\omega) = \varepsilon(\omega) \vec{E}(\omega), \quad (2.41)$$

gde je

$$\varepsilon(\omega) = 1 + f(\omega) \equiv 1 + \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) e^{i\omega t} dt. \quad (2.42)$$

Iz relacije (2.41) vidi se da je u slučaju brzo promenljivog elektromagnetnog polja veza između Furijeovih komponenata električne indukcije (\vec{D}), jačine električnog polja (\vec{E}) i dielektrične propustljivosti (ε) ista kao i u stacionarnom slučaju (2.36).

Pod frekventnom disperzijom dielektrične propustljivosti, odnosno permitivnosti (ε) podrazumeva se njena zavisnost od frekvencije (ω), tj. $\varepsilon = \varepsilon(\omega)$. S obzirom na činjenicu da je $f(t)$ realna funkcija, iz (2.42) proizilazi da je dielektrična propustljivost kompleksna veličina, pa se može napisati u sledećem obliku:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon'(\omega) + i\varepsilon''(\omega), \quad (2.43)$$

gde je $\varepsilon'(\omega)$ njen realni, a $\varepsilon''(\omega)$ imaginarni deo. Pri promeni znaka ω : ($\omega \rightarrow -\omega$), $\varepsilon(\omega)$ prelazi u: $\varepsilon(-\omega) = \varepsilon'(-\omega) + i\varepsilon''(-\omega) = \varepsilon'(\omega) - i\varepsilon''(\omega) \equiv \mathcal{E}^*(\omega)$, odakle sledi:

$$\varepsilon'(-\omega) = \varepsilon'(\omega); \quad \varepsilon''(-\omega) = -\varepsilon''(\omega), \quad (2.44)$$

Prema tome, realni deo permitivnosti predstavlja parnu a imaginarni deo neparnu funkciju od frekvencije (ω). Zbog toga se i između $\varepsilon'(\omega)$ i $\varepsilon''(\omega)$ mogu se uspostaviti važne relacije:

$$\begin{aligned} \varepsilon'(\omega) - 1 &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\varepsilon''(\omega)}{x - \omega} dx = \frac{2}{\pi} \int_0^{+\infty} \frac{x \varepsilon''(\omega)}{x^2 - \omega^2} dx; \\ \varepsilon''(\omega) &= -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\varepsilon'(\omega) - 1}{x - \omega} dx = \frac{2\omega}{\pi} \int_0^{+\infty} \frac{\varepsilon'(\omega)}{x^2 - \omega^2} dx, \end{aligned} \quad (2.45)$$

koje se nazivaju disperzione ili Kramers-Kronigove relacije [25,29,50,51]. Integrale u (2.45) neophodno je shvatiti u smislu njihove glavne vrednosti. Relacije (2.45) mogu biti iskorišćene za obradu eksperimentalnih podataka s obzirom da su $\varepsilon'(\omega)$ i $\varepsilon''(\omega)$ neposredno povezani sa optičkim karakteristikama sredine: indeksom prelamanja i koeficijentima (indeksima) apsorpcije i odbijanja.

⁷Ovde je iskorišćena definicija delta-funkcije:

$$\delta(\omega - \omega') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(\omega - \omega')t} dt.$$

2.5 Optičke karakteristike kristala

Disperzione relacije (2.45) pokazuju da ukoliko nam je poznata (npr. iz rezultata eksperimenta) zavisnost $\varepsilon''(\omega)$ u svim frekventnim opsezima, moguće je odrediti zavisnost $\varepsilon'(\omega)$ i obrnuto. Naravno, zavisnost $\varepsilon''(\omega)$ u praksi nikada nije moguće poznavati u svim intervalima frekvencija, ali ako nas zanima npr. $\varepsilon'(\omega)$ za frekvenciju ω , doprinos $\varepsilon'(x)$ za vrednosti x koje su daleko od nije od suštinskog značaja. Oblik krive $\varepsilon'(\omega)$ u tački ω određen je vrednostima $\varepsilon''(x)$ za vrednosti x koje su bliske ω , što dovodi do određenih relacija među krivama $\varepsilon'(\omega)$ i $\varepsilon''(\omega)$ u blizini ω . Velicki [51] je pokazao da važi sledeća frekventna korespondencija:

$$\begin{aligned} \text{pik indeksa prelamanja} &\leftrightarrow \text{apsorpcioni prag;} \\ \text{pad indeksa prelamanja} &\leftrightarrow \text{apsorpcioni pik.} \end{aligned}$$

Ovi zaključci⁸ potvrđeni su eksperimentalno.

Maksvel je pokazao [50,52] da je dielektrična konstanta sredine jednaka kvadratu indeksa prelamanja. Kao što je pokazano – dielektrična propustljivost u slučaju postojanja disperzije je kompleksna veličina, a njen realni i imaginarni deo povezani su sa optičkim karakteristikama sredine. Ako se uvede kompleksni indeks prelamanja:

$$\eta = n + i\kappa. \quad (2.46)$$

Da bi se ustanovio fizički smisao njegovog realnog (n) i imaginarnog (κ) dela, pretpostavlja se da je on povezan sa kompleksnom dielektričnom permitivnošću $\varepsilon(\omega)$ Maksvelovom jednačinom:

$$\varepsilon(\omega) \equiv \varepsilon'(\omega) + i\varepsilon''(\omega) = \eta^2 \equiv n^2 - \kappa^2 + 2in\kappa, \quad (2.47)$$

odakle sledi:

$$\varepsilon'(\omega) = n^2 - \kappa^2; \quad \varepsilon''(\omega) = 2in\kappa. \quad (2.48)$$

Na osnovu toga, mogu se naći izrazi za indekse apsorpcije i prelamanja u sledećoj formi:

$$\begin{aligned} \kappa \equiv \kappa(\omega) &= \sqrt{\frac{\varepsilon'(\omega)}{2} \left\{ \sqrt{1 + \left[\frac{\varepsilon''(\omega)}{\varepsilon'(\omega)} \right]^2} - 1 \right\}}; \\ n \equiv n(\omega) &= \sqrt{\frac{\varepsilon'(\omega)}{2} \left\{ \sqrt{1 + \left[\frac{\varepsilon''(\omega)}{\varepsilon'(\omega)} \right]^2} + 1 \right\}}. \end{aligned} \quad (2.49)$$

Zavisnosti $n = n(\omega)$ i $\kappa = \kappa(\omega)$ prikazane su na slici 2.3a i b, respektivno.

Radi definisanja indeksa (koeficijenta) odbijanja, polazi se od razmotranja postojanja/prostiranja ravnog elektromagnetnog talasa duž x -ose u sredini sa kompleksnom dielektričnom propustljivošću. Kao što će se uskoro videti, u tom slučaju talasni vektor \vec{k} takođe mora biti kompleksan. Vektor jačine električnog polja talasa određena je izrazom:

$$\vec{E} = \vec{E}_0 e^{i(kx - \omega t)}, \quad (2.50)$$

koji mora da zadovoljava talasnu jednačinu:

$$\nabla^2 \vec{E} = \frac{\varepsilon}{c^2} \vec{E}. \quad (2.51)$$

Uzimajući u obzir kompleksnu permitivnost $\varepsilon = \varepsilon(\omega)$, dobija se:

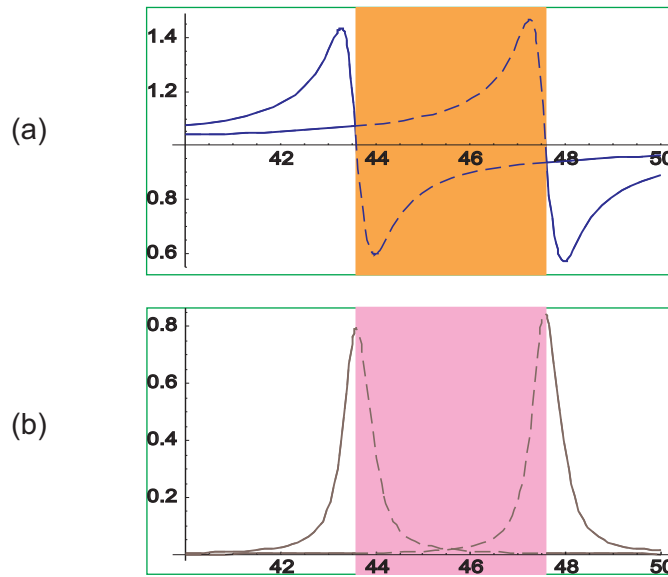
$$k^2 = \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \varepsilon = \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \eta^2 \Rightarrow k = \frac{\omega}{c} \eta = \frac{\omega}{c} (n + i\kappa). \quad (2.52)$$

⁸Prikaz ove zavisnosti dat je i na graficima – slika 2.3!

Uvrštavanje ove vrednosti u (2.50), ona prelazi u:

$$\vec{E} = \vec{E}_0 e^{-\frac{\omega}{c}\kappa x} e^{i\frac{\omega}{c_1}(x-c_1 t)}, \quad (2.53)$$

gde je $c_1 \equiv \frac{c}{n}$ – brzina svetlosti u datoj sredini. Odavde proizilazi da je realni deo kompleksnog indeksa prelamanja (n) obični indeks prelamanja, dok imaginarni deo (κ), koji se naziva *koeficijent ekstinkcije* [50–52], opisuje apsorpciju elektromagnetnog polja u datoj sredini.⁹



Slika 2.3: Indeksi prelamanja i apsorpcije molekuskog kristala

Prilikom prostiranja svetlosti duž x -ose u apsorpcionoj sredini smanjenje intenziteta svetlosti je eksponencijalno:

$$dI(x) = -\mu I dx \Rightarrow I(x) = I_0 e^{-\mu x}, \quad (2.54)$$

gde je μ – koeficijent apsorpcije, a $I_0 \equiv I(0)$. S obzirom da je $I \approx E^2$, iz (2.54) i (2.53) proizilazi:

$$\mu = \frac{2\omega\kappa}{c}. \quad (2.55)$$

Na ovaj način je definisana relacija između indeksa apsorpcije i indeksa ekstinkcije.

Formule (2.48) i (2.49) ukazuju na to da, ukoliko je apsorpcija mala sledi: $\epsilon' \simeq n^2$, a indeks apsorpcije se određuje imaginarnim delom dielektrične propustljivosti ϵ'' .

Za eksperimentalno određivanje optičkih karakteristika sredine n i κ često se koristi odbijanje svetlosti od ravne površi tela. Ako svetlost pada normalno na tu površ tela, koeficijent (indeks) refleksije se definiše sledećim izrazom [51–53]:

$$\mathfrak{R} = \left| \frac{\eta - 1}{\eta + 1} \right|^2 = \frac{(n - 1)^2 + \kappa^2}{(n + 1)^2 + \kappa^2}. \quad (2.56)$$

U slučaju male apsorpcije je: $\mathfrak{R} = \left(\frac{n - 1}{n + 1} \right)^2$ i merenje koeficijenta refleksije omogućava određivanje indeksa prelamanja:

$$n = \frac{1 + \sqrt{\mathfrak{R}}}{1 - \sqrt{\mathfrak{R}}}. \quad (2.57)$$

⁹Pri $x = \frac{c}{c\kappa}$, amplituda jačine električog polja opada e-puta!

2.6 Merenje dielektričnih i optičkih karakteristika materijala

Svaki materijal poseduje jedinstveni set električnih karakteristika. Tačno merenje ovih osobina može obezbediti naučnicima i inženjerima vredne informacije, koje im pružaju mogućnost da pravilno uključe ispitivane materijale u svoje aplikacije.

Permitivnost (ili dielektrična konstanta) opisuje interakciju materijala sa spoljašnjim električnim poljem, a permeabilnost opisuje interakciju materijala sa spoljašnjim magnetnim poljem. Obe ove fizičke veličine su kompleksne [52–54], tako da realni deo odgovara akumuliranoj energiji, dok imaginarni deo odgovara gubicima u materijalu.

Permitivnost zavisi, pre svega, od hemijskog sastava, a takođe i od fizičkih svojstava materijala (polarizacioni i relaksacioni procesi). Svaki polarizacioni mehanizam (elektronska, jonska, orjentaciona, međuslojna polarizacija) poseduje karakterističnu rezonantnu ili relaksacionu frekvenciju. Postoje skokovite promene u ϵ'_r , na karakterističnim frekvencijama, iznad kojih odgovarajuće sporije promene polarizacije ne mogu da prate promene naizmeničnog električnog polja, tako da sukcesivno opadaju sporiji tipovi polarizacije. Uočava se da i maksimumi dielektričnih gubitaka postoje na pomenutim karakterističnim frekvencijama zbog pojačane apsorpcije energije spoljašnjeg električnog polja na tim frekvencijama. Odnos tog dela apsorbovane energije prema preostalom delu električne energije uložene u polarizaciju dielektrika [53–55] predstavlja tangens ugla gubitaka ($\tan \delta$).

Kompleksna permitivnost se može prikazati pomoću *Cole-Cole* dijagrama, tako što se njen realni deo nanosi na x -osu, a imaginarni na y -osu sa frekvencijom kao nezavisnim parametrom [56]. Jedan kompletan sistem za merenje mora se sastojati od mernog instrumenta, kao što je analizator impedanse (impedance/gain-phase analyzer) ili mrežni analizator (network analyzer), zatim adaptera (test fixture), koji se koristi za ostvarivanje veze sa materijalom koji se testira (MUT – material under test) i PC računara sa odgovarajućim softverom za analizu i izračunavanje permitivnosti i permeabilnosti iz izmerenih vrednosti impedancije, kao i za čuvanje podataka u elektronskom obliku.

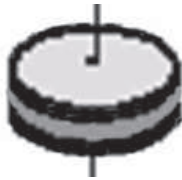
Postoji mnogo tipova instrumenata koji mogu biti korišćeni za ispitivanje materijala. *Hewlett-Packard* nudi mnoštvo LRC metara, analizatora impedancije i mrežnih analizatora [57]. LRC metri i analizatori impedancije koriste mostnu metodu (autobalancing bridge technique) za merenje impedancije materijala. *Hewlett-Packard* nudi kompletnu familiju LRC metara i analizatora impedancije koji obezbeđuju tačno merenje kapacitivnosti i nizak faktor disipacije između 5 Hz i 40 MHz. LRC metri vrše merenja na jednoj određenoj frekvenciji, dok analizatori impedancije mere u određenom opsegu frekvencija. Pored toga, *Hewlett-Packard* nudi i kompletnu familiju mrežnih analizatora pokrivajući frekvencijski opseg od 300 kHz do 110 GHz. Mrežni analizatori mere reflektovan ili transmitovan signal u funkciji frekvencije [58].

Analizator impedancije se koristi za merenje impedancije, otpornosti, kapacitivnosti, induktivnosti i promene faze različitih komponenti u zavisnosti od frekvencije. On pokriva opseg frekvencija od 100 Hz do 40 MHz (sa mogućnošću proširenja do 100 MHz). Instrument se takođe može podesiti da izračuna elemente ekvivalentnog modela kola. Može se povezati sa PC-jem, što omogućava da se sačuvaju izmereni rezultati (grafici, tabele, itd.) u elektronskom obliku [59].

2.6.1 Merne tehnike

Postoji pet osnovnih tehnika merenja koje se koriste u praksi:

1. Kondenzatorska metoda – pravljenje kondenzatora od uzorka (*Parallel Plate*),
2. Merenje refleksije u koaksijalnom vodu (*Coaxial probe*),
3. Merenje S parametara sekcije prenosnog voda (*Transmission line*),
4. Metod merenja Q faktora pomoću rezonantne šupljine – metod rezonantne šupljine (*Resonant cavity*),
5. Merenje u slobodnom prostoru korišćenjem predajne i prijemne antene (*Free-space*).



Slika 2.4: Kondenzatorska metoda

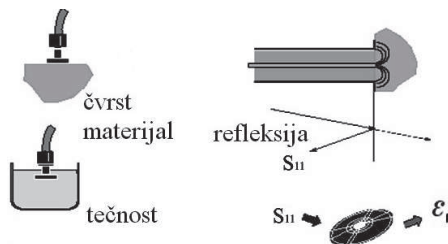
Kondenzatorska metoda sadrži tanak sloj materijala ili tečnosti između dve elektrode, tako da se na taj način formira kondenzator (slika 2.4).

Realni deo permitivnosti ϵ'_r se izračunava na osnovu merenja kapacitivnosti, debljine uzorka i površine elektroda, a imaginarni ϵ''_r se određuje iz merenja faktora disipacije ($\tan\delta$), pomoću sledećih jednačina:

$$C = \epsilon_0 \epsilon'_r \frac{S}{d}; \quad \tan \delta = \frac{\epsilon''_r}{\epsilon'_r} = \frac{1}{Q}. \quad (2.58)$$

Optimalna veličina prečnika ispitivanog uzorka kružnog poprečnog preseka je od 5 do 10 mm, a debljina od 1 do 3 mm. Dimenzije masivnog uzorka (bulk) najviše zavise od veličine držača uzorka i karakteristika samog uzorka (npr. što je veća otpornost uzorka površina poprečnog preseka treba da je što veća, a debljina manja).

Jedan tipičan sistem za merenje električnih i dielektričnih karakteristika materijala zasnovan na ovoj metodi sastoji se od LRC metra ili analizatora impedanse, ogovarajućeg adaptera i PC računara sa odgovarajućim softverom koji na osnovu izmerene impedanse preračunava dielektričnu konstantu [54]. Prednosti ove metode su: automatsko izračunavanje kompleksnog ϵ_r^* iz kapacitivnosti (C) i faktora gubitaka ($\tan \delta$), primenljiva je i za tanke listove materijala, filmove, itd. Nedostaci ove metode su: frekvencijsko ograničenje na oblast frekvencija do 100 MHz, nemogućnost merenja materijala sa magnetnim karakteristikama.



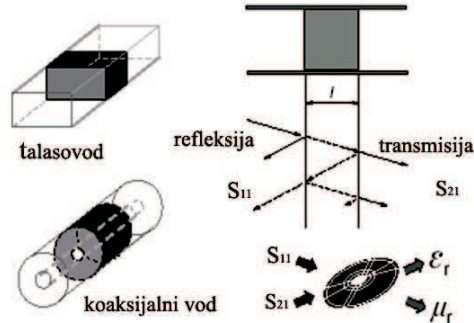
Slika 2.5: Metod merenja refleksije u koaksijalnom vodu

Metod merenja refleksije u koaksijalnom vodu koristi koaksijalni kabel i zasniva se na odbijanju transmisionne linije od posmatranog uzorka ili materijala. Karakteristike materijala se mere potapanjem sonde u tečnost ili postavljanjem vrha sonde na ravnu površinu čvrstog materijala ili praha. Polje se javlja na ivicama otvorenog kraja sonde i menja se kada dođe u kontakt sa materijalom koji se ispituje (slika 2.5). Reflektovan signal (S_{11}) se može izmeriti, a iz njega izraziti ϵ_r^* . Optimalna veličina unutrašnjeg prečnika ispitivanog uzorka prstenastog poprečnog preseka je oko 3 mm, spoljašnjeg od 7 do 10 mm, a debljina uzorka mora da bude manja od talasne dužine [57].

Jedan tipičan sistem za merenje zasnovan na ovoj metodi sastoji se od mrežnog analizatora, odgovarajućeg adaptera i PC računara sa odgovarajućim softverom koji konvertuje izmeren S parametar u permitivnost. Prednosti ove metode su: laka je za upotrebu, nedestruktivna je za mnoge materijale i primenljiva je u frekvencijskom opsegu od 200 MHz do 20 GHz. Ova metoda nije pogodna za materijale sa malim gubicima, magnetne materijale i gde je neophodna visoka tačnost.

Tehnika merenja S parametara sekcije prenosnog voda zasniva se na smeštanju ispitivanog materijala unutar dela ograničene transmisione linije [54]. Linija je uobičajeno deo (odsečak) pravougaonog talasovoda ili koaksijalnog kabla (slika 3). ε_r^* i μ_r^* se izračunavaju iz merenja reflektovanog signala (S_{11} i S_{22}) i prenetog signala (S_{21} i S_{12}).

Ova metoda može da se primeni i u frekventnom i u vremenskom domenu i najpogodnija je za merenja u širokom frekventnom opsegu, ali je tačnost nešto manja u odnosu na metod rezonantne šupljine. Osnova od koje polazi ova metoda leži u činjenici da karakteristična impedansa i konstanta prostiranja u transmisionim linijama i talasovodima zavise od dielektričnih i magnet-skih karakteristika sredine. Određivanje parametara sredine bilo bi lako i jednoznačno kada bi transmisione linije i talasovodi bili zatvoreni karakterističnom impedansom, a dužina ubačenog uzorka bila velika. S obzirom da su u praksi uzorci konačne dužine, to se zbog višestruke refleksije na razdvojnim površima javlja zavisnost koeficijenta refleksije i transmisije, ne samo od parametara sredine, već i od dužine uzorka. Ovo pri proračunu permitivnosti i permeabilnosti prouzrokuje nejednoznačnost rešenja i iziskuje dodatne napore za izbor pravog rešenja. Debljina uzorka mora da bude manja od talasne dužine [57].



Slika 2.6: Metod merenja S parametara sekcije prenosnog voda

Permitivnost i permeabilnost se izračunavaju pomoću S parametara, pri čemu se oni dobijaju iz koeficijenata refleksije R i transmisije τ :

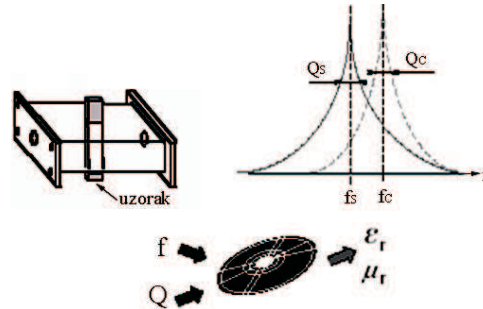
$$\varepsilon_r = \frac{\lambda_0^2 \left(\frac{1}{\Lambda^2} + \frac{1}{\lambda_c^2} \right)}{\mu_r}; \quad \mu_r = \frac{1 + R}{\Lambda (1 - R) \left(\frac{1}{\lambda_0^2} - \frac{1}{\lambda_c^2} \right)}. \quad (2.59)$$

Veza između koeficijenata R , Λ , τ i S parametara, kao i izvođenje jednačine (2.59) dato je u [60]. Izračunavanje permitivnosti i permeabilnosti kod metode merenja refleksije u koaksijalnom vodu se dobija na sličan način, pri čemu se uzima u obzir razlika u geometriji i činjenica da je koaksijalni vod na jednom kraju zatvoren.

Tipičan sistem za merenje zasnovan na ovoj tehnici sastoji se od vektor mrežnog analizatora, koaksijalnog kabla ili dela talasovoda i eksternog PC računara sa softverom koji konvertuje izmerene S parametre u permitivnost i permeabilnost.

Prednosti ove metode su: obezbeđuje ε_r^* i μ_r^* , primenljiva je za čvrste materijale i koristi jednostavan adapter. Iako je ova metoda tačnija od tehnike merenja refleksije u koaksijalnom vodu, ona je ipak donekle ograničena u rezoluciji za materijale sa malim gubicima [54].

Metod merenja Q faktora pomoću rezonantne šupljine koristi ćeliju koja rezonuje na određenim frekvencijama. Uzorak materijala utiče na rezonantnu frekvenciju (f_c) i Q faktor (slika 2.7). Iz ovih parametara može se izračunati kompleksna permitivnost (ϵ_r^*) i permeabilnost (μ_r^*) materijala na određenoj frekvenciji.



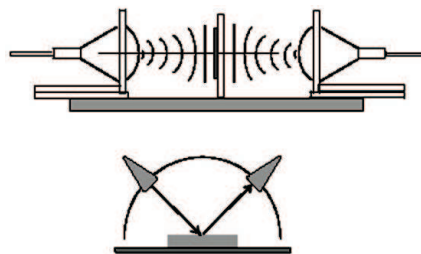
Slika 2.7: Metod merenja Q faktora pomoću rezonantne šupljine

Permitivnost se izračunava na osnovu sledećih jednačina [54–60]:

$$\epsilon_r' = \frac{V_c(f_c - f_s)}{2V_s f_s} + 1, \quad \epsilon_r'' = \frac{V_c}{4V_s} \left(\frac{1}{Q_s} - \frac{1}{Q_c} \right), \quad (2.60)$$

gde je V zapremina, indeks c se odnosi na praznu rezonantnu šupljinu, a s kada se u rezonantnoj šupljini nalazi ispitivani uzorak.

Jedan tipičan sistem za merenje zasnovan na ovoj metodi sadrži mrežni analizator, odgovarajući adapter i eksterni PC računar sa odgovarajućim softverom. Ova tehnika poseduje najveću tačnost od svih pet tehnika, posebno za materijale sa malim gubicima. Ona obezbeđuju veoma dobru tačnost, ali nije pogodna za merenje u širokom frekventnom opsegu, već samo u uskom oko rezonantne učestanosti. Primenuje se isključivo analiza u frekventnom domenu, koja zna biti dosta kompleksna.

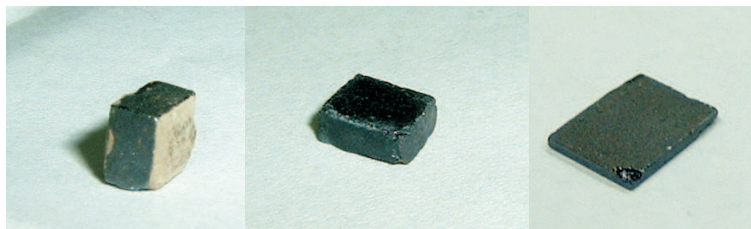


Slika 2.8: Metod merenja u slobodnom prostoru korišćenjem predajne i prijemne antene

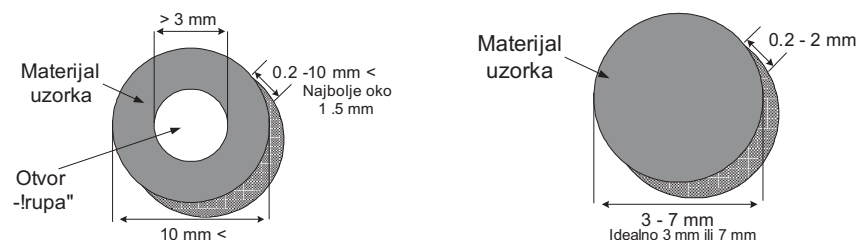
Tehnika merenja u slobodnom prostoru korišćenjem predajne i prijemne antene koristi antene da fokusira mikrotalasnu energiju kroz pločicu materijala bez upotrebe adaptera (slika 2.8). Neki algoritmi koji su upotrebljeni kod tehnike merenja S parametara sekcije prenosnog voda mogu biti primenjeni i kod ove metode. Tipičan sistem za merenje zasnovan na ovoj metodi sastoji se od vektor mrežnog analizatora, antena i eksternog PC računara sa odgovarajućim softverom koji izmerene S parametre konvertuje u permitivnost i permeabilnost.

Ova tehnika je pogodna za primenu kod velikih ravnih uzoraka. Takođe, ova metoda je bezkontaktna, često i nedestruktivna i upotrebjljiva pri visokim temperaturama. Međutim, ova metoda zahteva posebnu kalibraciju budući da je bezkontaktna. Pored toga ona zahteva i velike, ravne i tanke uzorke što predstavlja veliki nedostatak ove metode.

Jedan od najvažnijih razloga za izbor merne tehnike je frekvencijski opseg. Prethodno razmatrane tehnike pružaju mogućnost merenja u frekvencijskom opsegu od 0,1 mHz do 100 GHz. Uzorci koji se stavljaju u temperaturnu komoru, treba da su oblika paralelopipeda (pogl. slike) ili valjka. Dimenzije uzoraka zavise od vrsta uzoraka. Npr. ako imaju veliku otpornost, treba da su što tanji (manje od 1 mm) i veće površine (do 10×10mm). Valjkasti uzorci treba da imaju prečnik do 13 mm. Optimalna debljina uzoraka je (1 – 3) mm, a sve uzorke je potrebno staviti provodnu pastu (npr. srebrnu) na kontaktne površi.



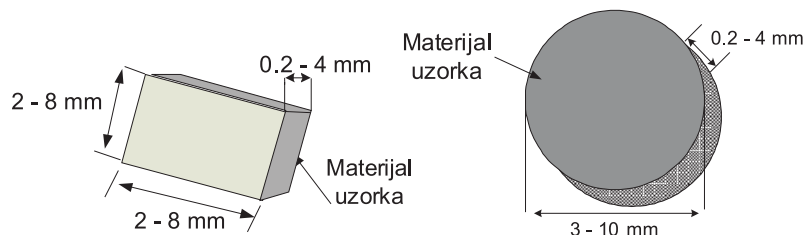
Slika 2.9: Izgled uzoraka

Slika 2.10: Oblik uzorka za merenja *Network analyzer*-om parametra

$$\mu_r = F(f), \quad f = 300 \text{ kHz} - 2 \text{ GHz} - (\text{levo})$$

$$\varepsilon_r, Z, R, X, \rho, \sigma, \tan \delta = F(f), \quad f = 300 \text{ kHz} - 2 \text{ GHz} - (\text{desno})$$

Za merenje električnih karakteristika *praškastih* uzoraka *Network analyzer*-om parametara $\varepsilon_r, Z, R, X, \rho, \sigma, \tan \delta = F(f)$, $f = 300 \text{ kHz} - 2 \text{ GHz}$ potrebno je minimalno oko 10 mm³ materijala. Trenutno sva merenja *Network analyzer*-om su na sobnoj temperaturi. Na uzorke se ne stavlja provodna pasta. Ova merenja mogu da se urade na temperaturama od 25 – 250 °C. Na uzorke se stavlja provodna pasta na dve paralelne (veće) površine (pravi se kondenzator).

Slika 2.11: Oblik uzoraka za merenja *Impedance analyzer*-om parametara

$$\varepsilon_r, Z, R, X, \rho, \sigma, \tan \delta = F(f), \quad f = 100 \text{ Hz} - 40 \text{ MHz}$$

2.6.2 Realizovani merni sistem

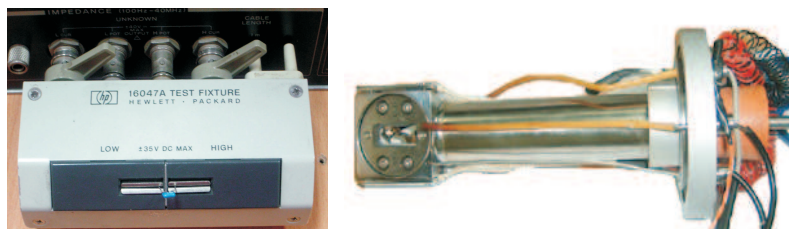
U cilju ispitivanja masivnih uzoraka u opsegu temperatura od 77 K do 500 K, realizovan je AC-impedansni sistem kontrolisan računarom (HP 4194A *Impedance/Gain-Phase Analyzer*, Hewlett-Packard Japan, Ltd.) prikazan na slici 2.12. Prilikom merenja koristi se adapter 16047A (slika 2.13). Ispitivani uzorak postavlja se u temperaturnu komoru (RIIC variable temperature cell VLT-2) (slika 2.13), pri čemu konstantnu temperaturu održava temperaturni kontroler (*Beckman model CTC 250*). Sva električna merenja realne i imaginarne komponente impedanse (R i X), kao i realne i imaginarne komponente admitanse (G i B) mogu se izvoditi u frekvencijskom opsegu od 100 Hz do 40 MHz sa mogućnošću proširenja do 100 MHz sa odgovarajućom sondom. Rezolucija merenja može se podešavati od 1 do 400 mernih tačaka na pomenutom frekvencijskom intervalu.

Komunikacija instrumenta 4194A i računara ostvarena je preko serijskog kabela i *National Instrument* kartice. Prilikom merenja pomoću računarskog programa, onemogućeno je vršiti podešavanja na instrumentu i obrnuto. Sam prenos podataka sa instrumenta na računar traje nekoliko sekundi. Program merenja impedanse realizovan je u programskom okruženju *LabVIEW*, koje je vrlo zahvalno za rad jer poseduje veliki broj mogućnosti i datih primera za realizaciju konkretnih problema.



Slika 2.12: Uređaj *Impedance/Gain-Phase Analyzer* HP 4194A

HP 4194A analizator impedancije koristi mostnu metodu (auto balancing bridge) za merenje impedancije. Ova metoda predstavlja najbolji izbor od mogućih šest metoda za merenje impedancije u opsegu od 100 Hz do 100 MHz.



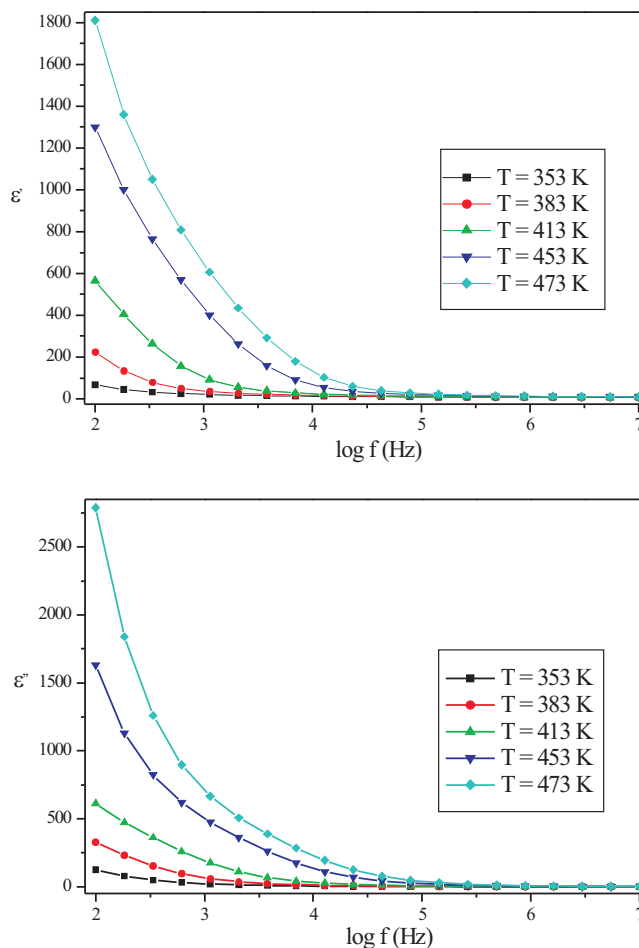
Slika 2.13: 16047A adapter levo i unutrašnji izgled temperaturne komore (desno)

Rezultati merenja na konkretnim masivnim uzorcima sa realizovanim AC-impedancnim sistemom objavljeni su u [60–62].

Odnos izmerenih otpornosti i frekvencije kao što se očekuje, smanjuje električnu provodnost, a provodnost raste sa porastom frekvencije i temperature. Visoka relativna dielektrična permisivnost se nalazi na višim temperaturama i nižoj frekvenciji (slici 2.14). Disperzija dielektričnih svojstava je očigledna. Na visokim frekvencijama (≥ 105 Hz) vrednost realnog dela dielektrične

permitivnosti je oko 15, a skoro nezavisne od temperature i frekvencije. Na niskim frekvencijama realni deo dielektrične permitivnosti raste sa porastom temperature, dostiže maksimalne vrednosti 1810, 1300, 565, 224 i 67,7 merene na 473, 453, 413, 383 i 353 K, respektivno. Što se tiče temperaturske zavisnosti, realni deo dielektrične konstante (slika 2.14a,b), pokazuje opadanje sa povećanjem frekvencije. Temperatura povećava veličinu relativne permitivnosti. Slične zavisnosti pronađene su u različitim keramičkim materijalima. Ovo je primetno mnogo više na nižim frekvencijama.

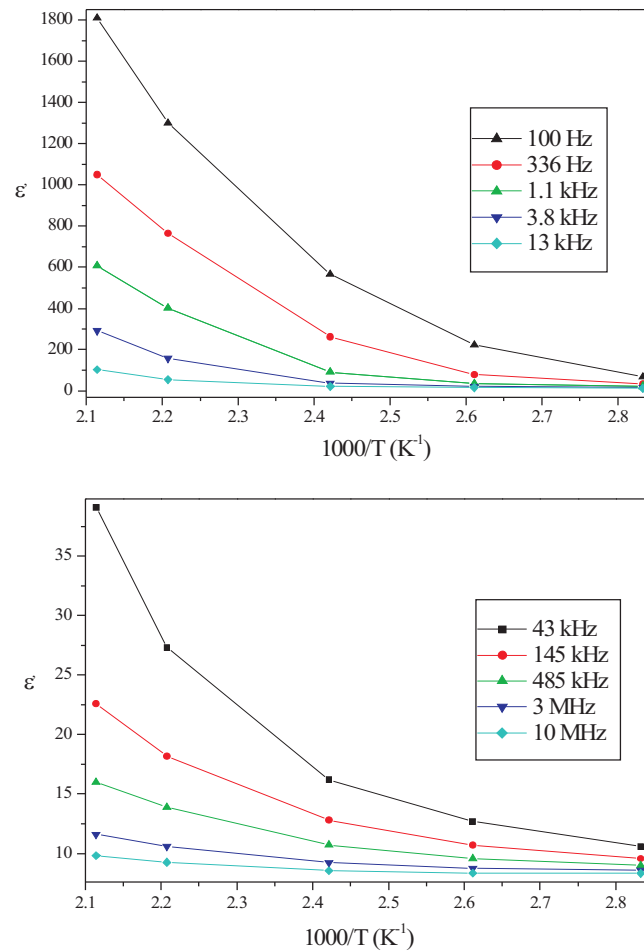
Na slici 2.14 prikazan je realni (a) i imaginarni (b) deo dielektrične permitivnosti kao funkcija frekvencije na nekoliko temperatura, a na slici 2.15 dielektrična permitivnost u funkciji od temperature: (a) manje i (b) više frekvencije



Slika 2.14: Realni (a) i imaginarni (b) deo dielektrične permitivnosti

Izbor najbolje tehnike za zadatu aplikaciju nije uvek lak budući da zavisi od velikog broja faktora. On zavisi od: frekvenjskog opsega, očekivane vrednosti ϵ_r^* i μ_r^* , zahtevane tačnosti merenja, karakteristika materijala (homogeneost, izotropnost, ...), stanja materijala (tečno ili čvrsto stanje), ograničenja veličine uzorka, metode merenja (destruktivna, nedestruktivna, kontaktna ili bezkontaktna), temperature na kojoj se meri, cene i mnogo toga još. Jedan od načina, koji se najčešće koristi, za izbor merne tehnike je frekvenjski opseg. Predhodno razmatrane tehnike pružaju mogućnost merenja u frekvenjskom opsegu od 0,1 mHz do 100 GHz.

Zavisnost od frekvencije je zajednička za sve realne električne komponente zbog prisustva parazitnih elemenata. Ne utiču svi parazitni efekti podjednako na merenja, ali neki bitno određuju frekvencijsku karakteristiku komponenti.



Slika 2.15: Realni (a) i imaginarni (b) deo dielektrične permitivnosti

Detaljnije je opisan realizovani AC-impedansni sistem, koji koristi kondenzatorsku metodu merenja masivnih uzoraka u opsegu od 100 Hz do 100 MHz, pri temperaturama od 77 do 500 K.

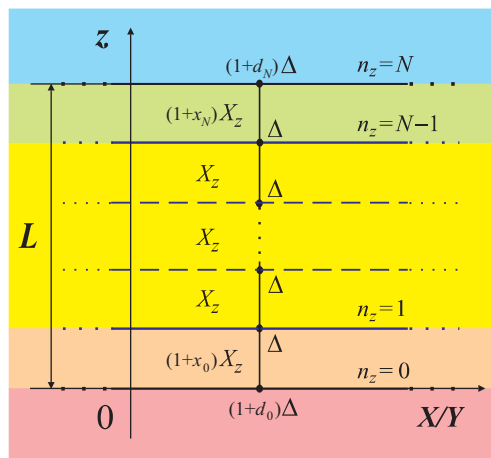
3 Eksitoni u ultratankim kristalnim filmovima

U prethodnoj glavi određene su i izračunate, te grafički predstavljene energije eksitona, odnosno njihov zakon disperzije, kao i dielektrična permitivnost i osnovna optiča svojstva (indeksi prelamanja i apsorpcije) u neograničenim kristalnim strukturama sa primitivnom i složenom rešetkom. Primenjujući isti pristup, ovde ćemo odrediti iste karakteristike 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 [63–70]. Sistemi koji imaju dve paralelne granične površine nazivaju se filmovima. Posmatra se idealni tanki film kubne kristalne strukture, načinjen na substratu nekim tehnološkim postupkom (naparavanjem, raspršivanjem i sl.). Pojam idealni ovde se koristi u smislu nepostojanja narušenja unutrašnje kristalne strukture (bez prisustva defekata, primesa i sl.), a ne u smislu prostorne neograničenosti i nepostojanja narušenja translacione invarijantnosti relevantnih energetske parametara sistema. Dimenzije filma su takve da je on u XY ravnima beskonačan, a u z -pravcima ima konačnu debljinu (L). Znači da ovaj film poseduje dve beskonačne granične površi paralelne XY -ravnima i to za: $z = 0$ i $z = L$

3.1 Model molekuskog filma

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



Slika 3.1: Presek modela molekuskog 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 ($n_z = 1$; $n_z = N - 1$):

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

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

Pošto su granične površi filma uzete normalno na z -pravac, indeks sloja n_z u (3.1) uzima vrednosti $n_z = 0, 1, 2, \dots, N$, gde je $N \in [2, 10]$ kod ultratankih filmova. Indeksi n_x i n_y ,

koji određuju položaj molekula u svakom sloju mogu imati proizvoljne celobrojne vrednosti (praktično, od $-\infty$, do $+\infty$).

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

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

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

$$\begin{aligned}& \hbar\omega \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} e^{ik_x a_x (n_x - m_x)} e^{ik_y a_y (n_y - m_y)} G_{n_z m_z} = \\ &= \frac{i\hbar}{2\pi} \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} e^{ik_x a_x (n_x - m_x)} e^{ik_y a_y (n_y - m_y)} \delta_{n_z m_z} + \\ &+ \Delta (1 + d_0 \delta_{n_z, 0} + d_N \delta_{n_z, N}) \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} e^{ik_x a_x (n_x - m_x)} e^{ik_y a_y (n_y - m_y)} G_{n_z, m_z} + \\ &+ X_x \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} e^{ik_x a_x (n_x + 1 - m_x)} e^{ik_y a_y (n_y - m_y)} G_{n_z, m_z} + \\ &+ X_x \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} e^{ik_x a_x (n_x - 1 - m_x)} e^{ik_y a_y (n_y - m_y)} G_{n_z, m_z} + \\ &+ X_y \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} e^{ik_x a_x (n_x - m_x)} e^{ik_y a_y (n_y + 1 - m_y)} G_{n_z, m_z} + \\ &+ X_y \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} e^{ik_x a_x (n_x - m_x)} e^{ik_y a_y (n_y - 1 - m_y)} G_{n_z, m_z} + \\ &+ X_z (1 + x_0 \delta_{n_z, 0} + x_N \delta_{n_z, N-1}) \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} e^{ik_x a_x (n_x - m_x)} e^{ik_y a_y (n_y - m_y)} G_{n_z + 1, m_z} + \\ &+ X_z (1 + x_0 \delta_{n_z, 1} + x_N \delta_{n_z, N}) \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k_x k_y} e^{ik_x a_x (n_x - m_x)} e^{ik_y a_y (n_y - m_y)} G_{n_z - 1, m_z}.\end{aligned}\quad (3.3)$$

Daljim sređivanjem se dobija:

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

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

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

gde je uvedena smena:

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

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

3.2 Zakon disperzije

U cilju nalaženja eksitonskih energija potrebni su nam polovi Grinovih funkcija, koji se dobijaju kada iste teže beskonačnosti, što znači da mora biti [71–73]:

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

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

$$\mathcal{D}_{N+1}(\varrho) = \begin{vmatrix} \varrho + \frac{\Delta}{|X|}d_0 & 1 + x_0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 + x_0 & \varrho & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \varrho & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \ddots & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & \varrho & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & \varrho & 1 + x_N \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 + x_N & \varrho + \frac{\Delta}{|X|}d_N \end{vmatrix}_{N+1} \quad (3.8)$$

Uslov (3.7) rešavaćemo za slučaj perturbovanog molekulskog filma sa pet kristalnih ravni duž z -pravca ($N = 4$). Granični parametri će biti menjani u sledećim intervalima [74–76]: $\{d_0, d_N\} \in [-0, 2; +0, 2]$ (promena energije Δ na graničnim ravnima – do 20 % i to 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).¹⁰

Proračuni su, zbog nemogućnosti nalaženja analitičkog rešenja, rađeni uz pomoć programskog paketa *MATHEMATICA* 4.0, a grafički obrađeni pomoću *COREL* 9.0 i tekstualno sređeni u *MIKTEX* 2e. Rezultati ovih proračuna grafički su prikazani na slikama 3.2 do 3.16. Kao i kod odgovarajućih balk-kristalnih struktura, i ovde se na ordinatama nalaze vrednosti redukovanih energija $\mathcal{E}_\nu^* = \frac{\hbar\omega - \Delta}{|X|} \equiv \varrho_\nu - \mathcal{F}_{xy}^*$; $\nu = 1, 2, 3 \dots, N + 1$; u zavisnosti od bezdimenzione funkcije $\mathcal{F}_{xy}^* \equiv 2(\cos ak_x + \cos ak_y)$ na apscisama grafika.

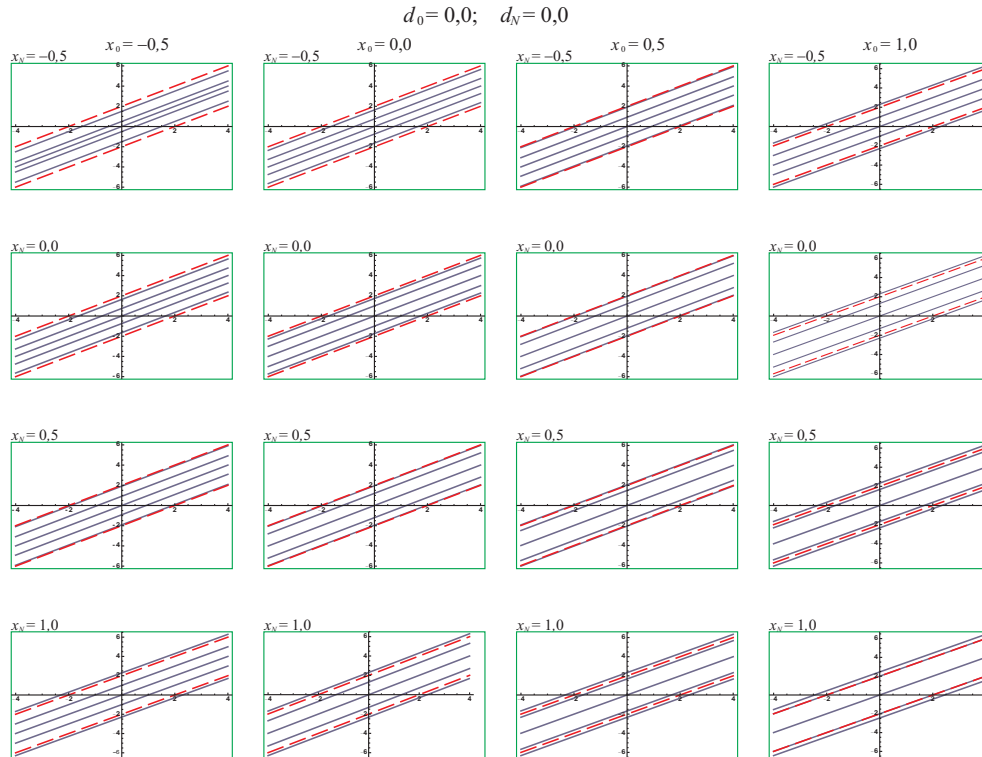
Na slikama 3.2-16 prikazani su grafici redukovane energije eksitona (\mathcal{E}) petoslojnog molekulskog filma (punim linijama) u zavisnosti od dvodimenzione funkcije (\mathcal{F}) pri čemu se menja

¹⁰Energije transfera u graničnim slojevima (X) ne mogu se smanjiti više od 99,99 %, jer i u tom sličaju praktično ne postoje interakcije molekula sa graničnih i njima susednih unutar-filmskih ravni. Ukoliko bi se uzelo $\{x_0, x_N\} \leq -1$, onda bi se karakter međumolekulske interakcije promenio (privlačna \Leftrightarrow odbojna). Ukoliko bi se uzelo $\{x_0, x_N\} \geq 2$, onda bi se jako narušio odnos veličina Δ i X , a to bi značilo da se promenio i tip molekulskog kristala u kome se formiraju Frenkelovi eksitoni [23–27,66–68] i koji se ovde razmatraju.

S druge strane, izbor veličine perturbacionih parametara izvršena je proračunom prema kojem ukupna promena energije izolovanog eksitona $\Delta_{0/N}$ na graničnim površima, uključujući relativan odnos sa izmenschkom energijom $X_{0,1/N-1,N}$ u graničnim slojevima: $\frac{\Delta_{0/N}}{X_{0,1/N-1,N}} \simeq 50 \div 100$, ne sme biti perturbovan za više od 50 %, što su i eksperimentalne činjenice.

energetska perturbacija d energije molekula na čvoru Δ kada se molekul nalazi na graničnim ravnima ($n_z = 0$ i $n_z = N$), tj. $\Delta_{0,N} = (1 + d_{0,N})\Delta$ kao i perturbacija x energije transfera eksitona (međumolekulska interakcija) između graničnih i njima susednih ravni ($n_z = 0$ i $n_z = 1$, tj. $n_z = N$ i $n_z = N - 1$): $X_{0,N} = (1 + x_{0,N})X$.

Na slikama 3.2-4 parametar $d_0 = 0,0$, dok se d_N menja od $-0,2$ do $+0,2$ u koracima od po $0,1$ ($d_N = -0,2; -0,1; 0,0; +0,1; +0,2$). Za svaki par padametara d_0 i d_N izmjenki granični perturbacioni parametri su uzimali sledece vrednosti: $x_{0,N} = -0,5; 0,0; +0,5; +1,0$

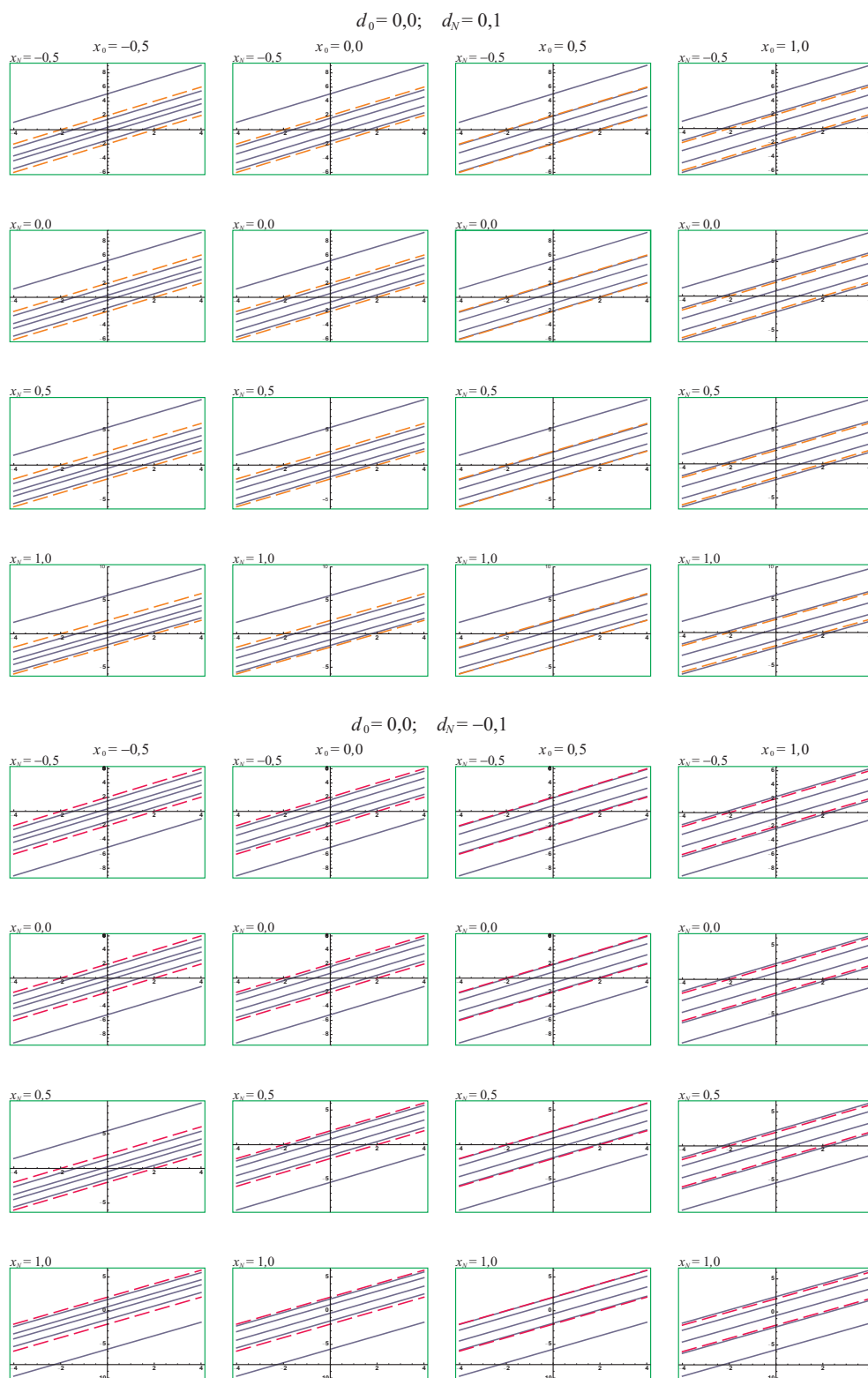


Slika 3.2: Eksitonske energije molekulskog filma

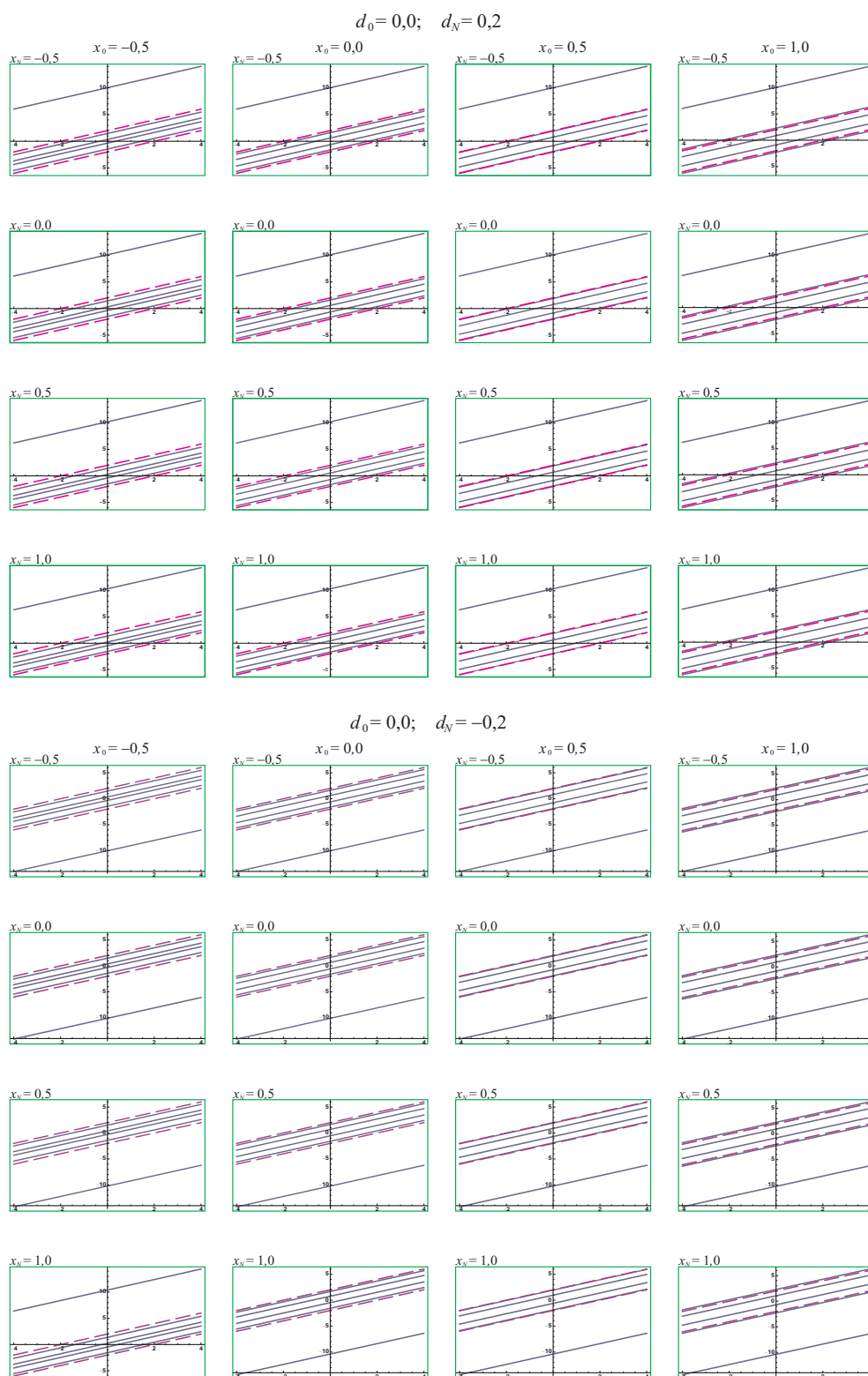
Analizom ovih grafika može se zaključiti da se povećanjem (odnosno, smanjenjem) parametra d_N , spektar mogućih eksitonskih energija širi i to pomeranjem ka višim (tj. ka nižim) energijama. Ovo pomeranje se dešava tako da se uvek jedan energetski nivo „izbacuje” van balkovske zone (označene isprekidanim linijama) kada su vrednosti parametara d_0 i d_N različite. Za veće vrednosti parametara $x_{0/N}$ tri nivoa su locirana van balkovskih granica. Kada su vrednosti parametara d_0 i d_N jednake, dolazi do izbacivanja dva stanja van balkovske zone sa iste strane (iznad ili ispod te zone).

Ovi „izbačeni” nivoi su udaljeniji od balkovske zone što je perturbacija veća, odnosno, što je parametar d po apsolutnoj vrednosti veći.

Ovakva izdvojena stanja su poznata pod nazivom tamovska ili lokalizovana stanja [66–70, 76–79]. Ono što se ovde vidi je da se ova stanja javljaju i da su ona dislocirana iz zone dozvoljenih energija eksitona u neograničenim strukturama, ali se ne može tvrditi kolika je verovatnoća njihovog nalaženja niti gde se ona mogu pojaviti. Zbog toga će ova analiza biti posebno urađena u sledećem paragrafu.

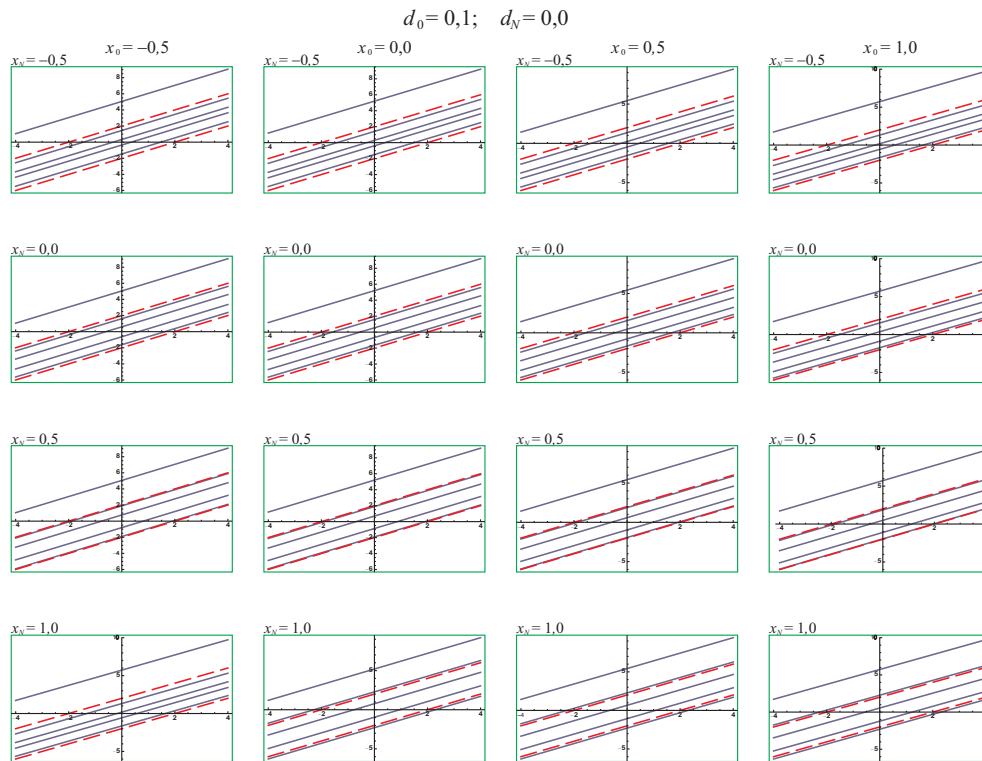


Slika 3.3: Eksitonske energije molekuskog filma



Slika 3.4: Eksitonske energije molekuskog filma

Na slikama 3.5-7 parametar $d_0 = 0,1$, dok se d_N menja od $-0,2$ do $+0,2$ u koracima od po $0,1$ ($d_N = -0,2; -0,1; 0,0; +0,1; +0,2$). Za svaki par parametara d_0 i d_N izmjeniski granični perturbacioni parametri su uzimali sledeće vrednosti: $x_{0,N} = -0,5; 0,0; +0,5; +1,0$

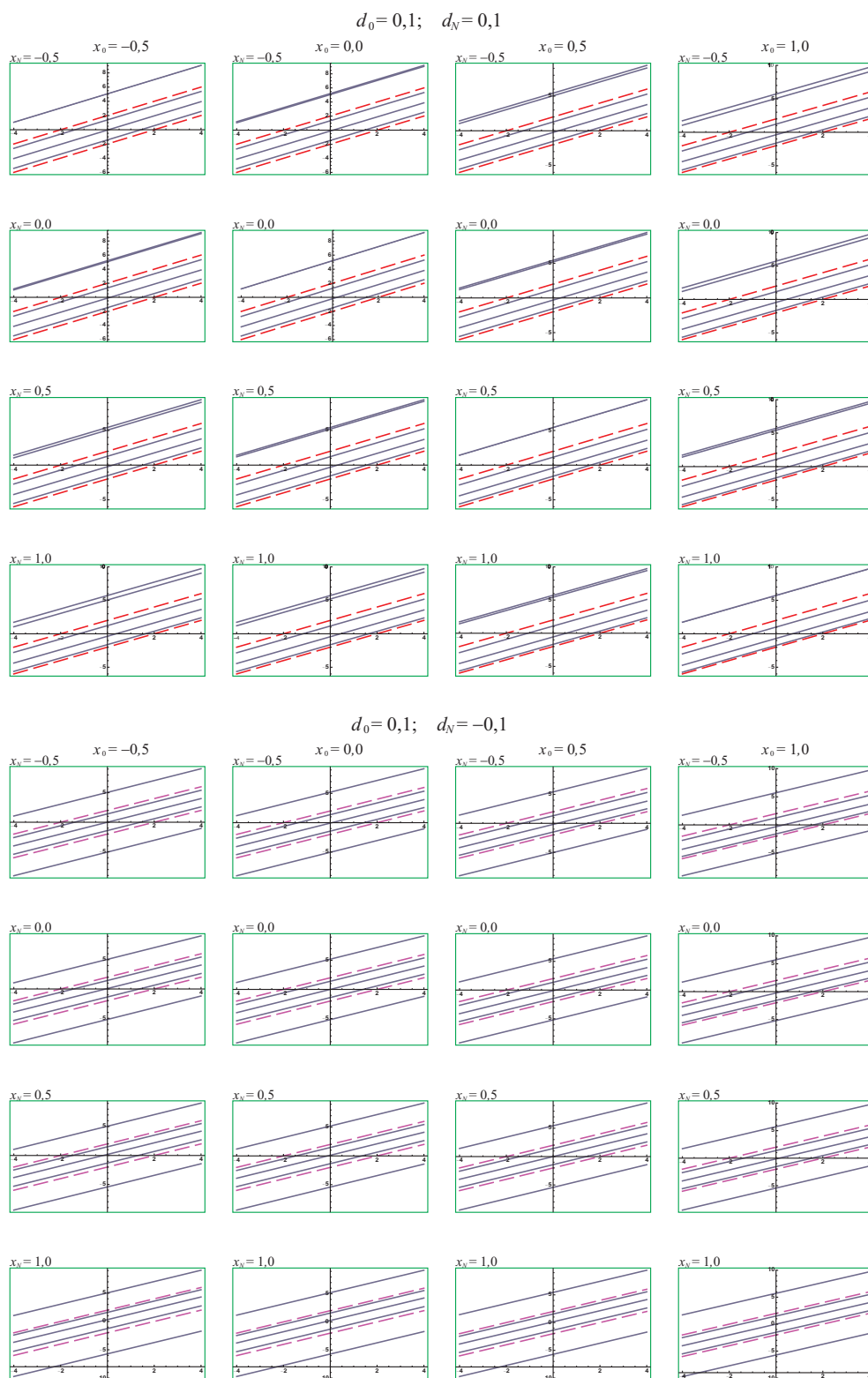


Slika 3.5: Eksitonske energije molekuskog filma

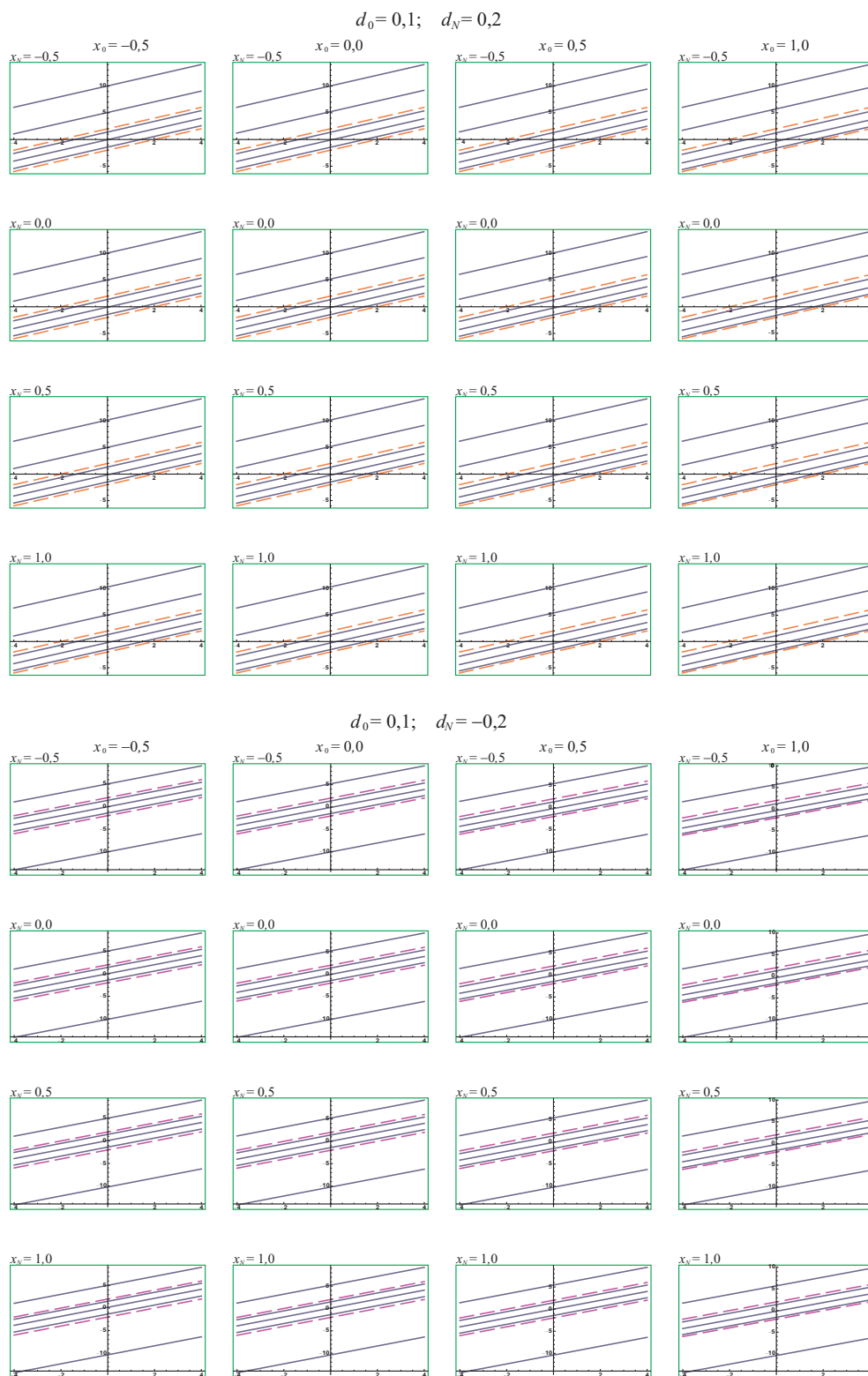
Analizom ovih grafika može se zaključiti da se povećanjem (odnosno, smanjenjem) parametra d_N , spektar mogućih eksitonskih energija širi i to pomeranjem ka višim (tj. ka nižim) energijama. Ovo pomeranje se dešava tako da se samo jedan energetski nivo „izbacuje” van balkovske zone (označene isprekidanim linijama) kada je vrednost parametara $d_N = 0,0$. Za ostale vrednosti parametara d_N , dolazi do simetričnog ili asimetričnog izbacivanja dva stanja van balkovske zone.

Ovi „izbačeni” nivoi su udaljeniji od balkovske zone što je perturbacija veća, odnosno, što je parametar d po apsolutnoj vrednosti veći.

Ovakva izdvojena stanja su poznata pod nazivom tamovska ili lokalizovana stanja [66–70, 76–79]. Ono što se ovde vidi je da se ova stanja javljaju i da su ona dislocirana iz zone dozvoljenih energija eksitona u neograničenim strukturama, ali se ne može tvrditi kolika je verovatnoća njihovog nalaženja niti gde se ona mogu pojaviti. Zbog toga će ova analiza biti posebno urađena u sledećem paragrafu.

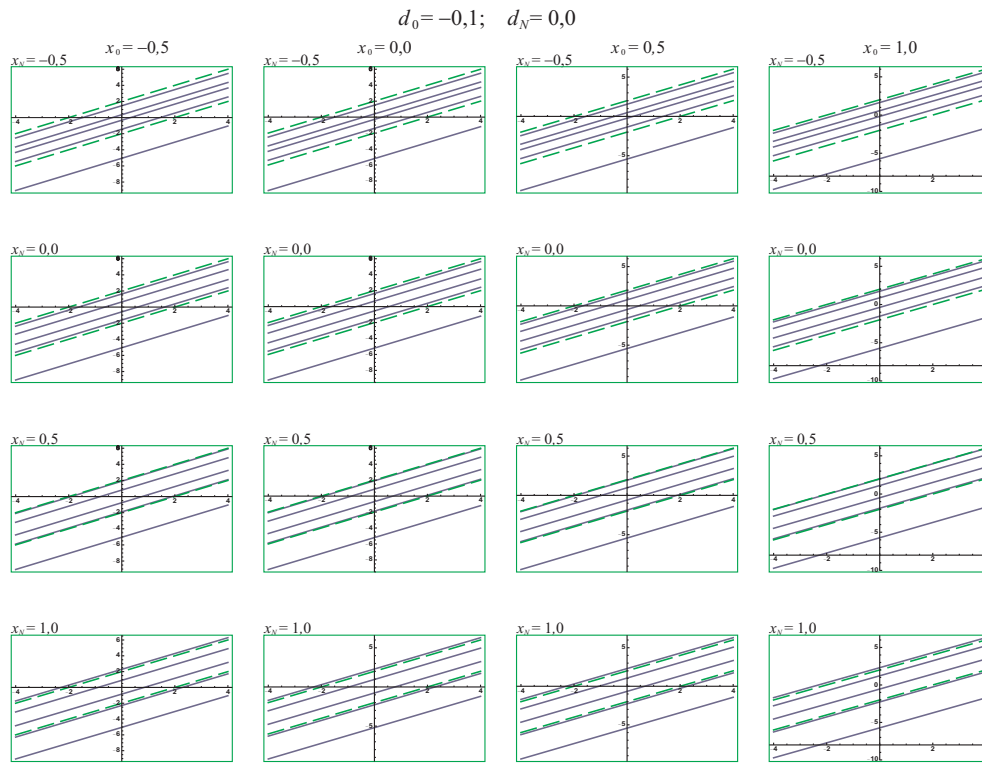


Slika 3.6: Eksitonske energije molekuskog filma



Slika 3.7: Eksitonske energije molekuskog filma

Na slikama 3.8-10 parametar $d_0 = -0,1$, dok se d_N menja od $-0,2$ do $+0,2$ u koracima od po $0,1$ ($d_N = -0,2; -0,1; 0,0; +0,1; +0,2$). Za svaki par parametara d_0 i d_N izmjeniski granični perturbacioni parametri su uzimali sledeće vrednosti: $x_{0,N} = -0,5; 0,0; +0,5; +1,0$

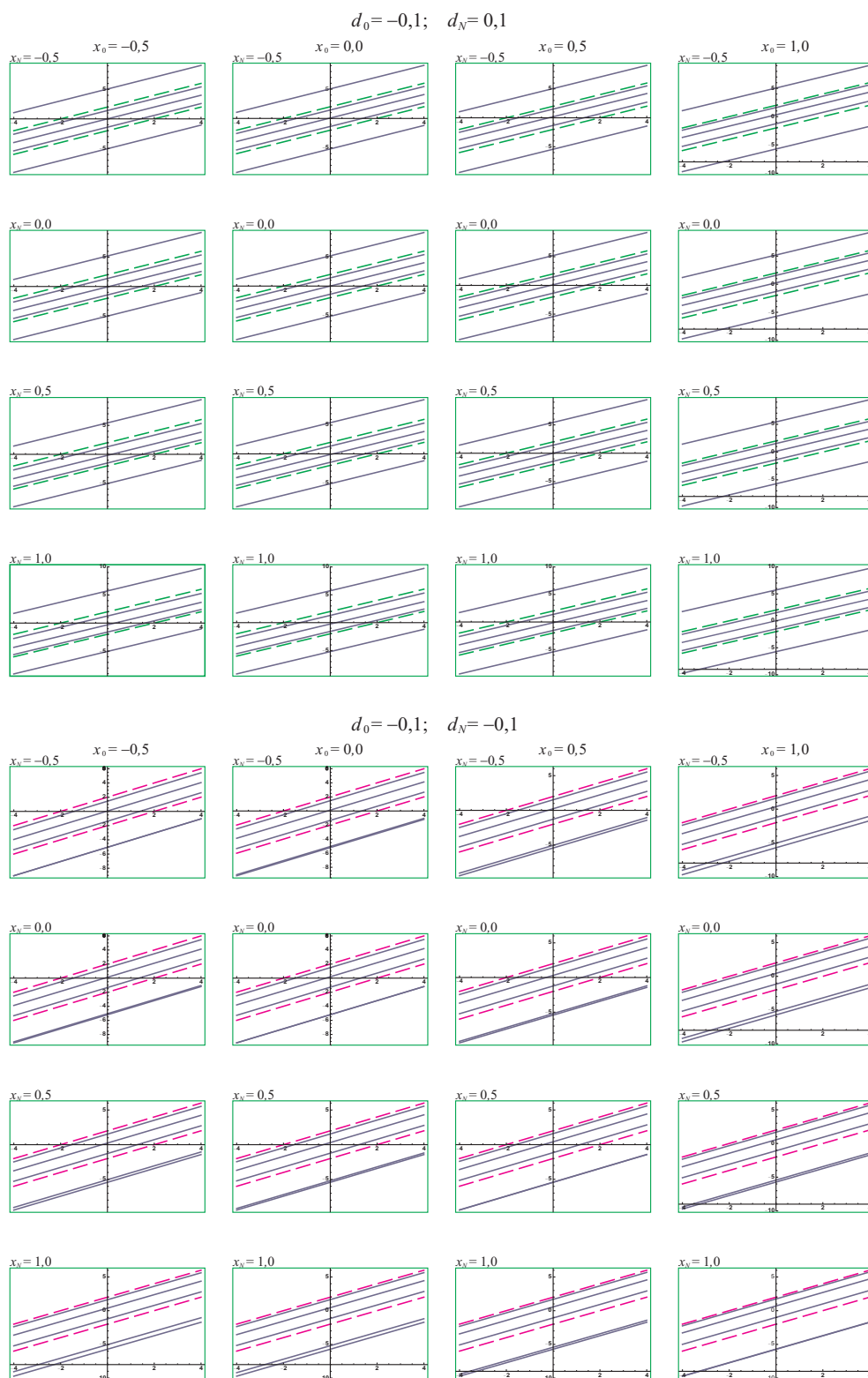


Slika 3.8: Eksitonske energije molekuskog filma

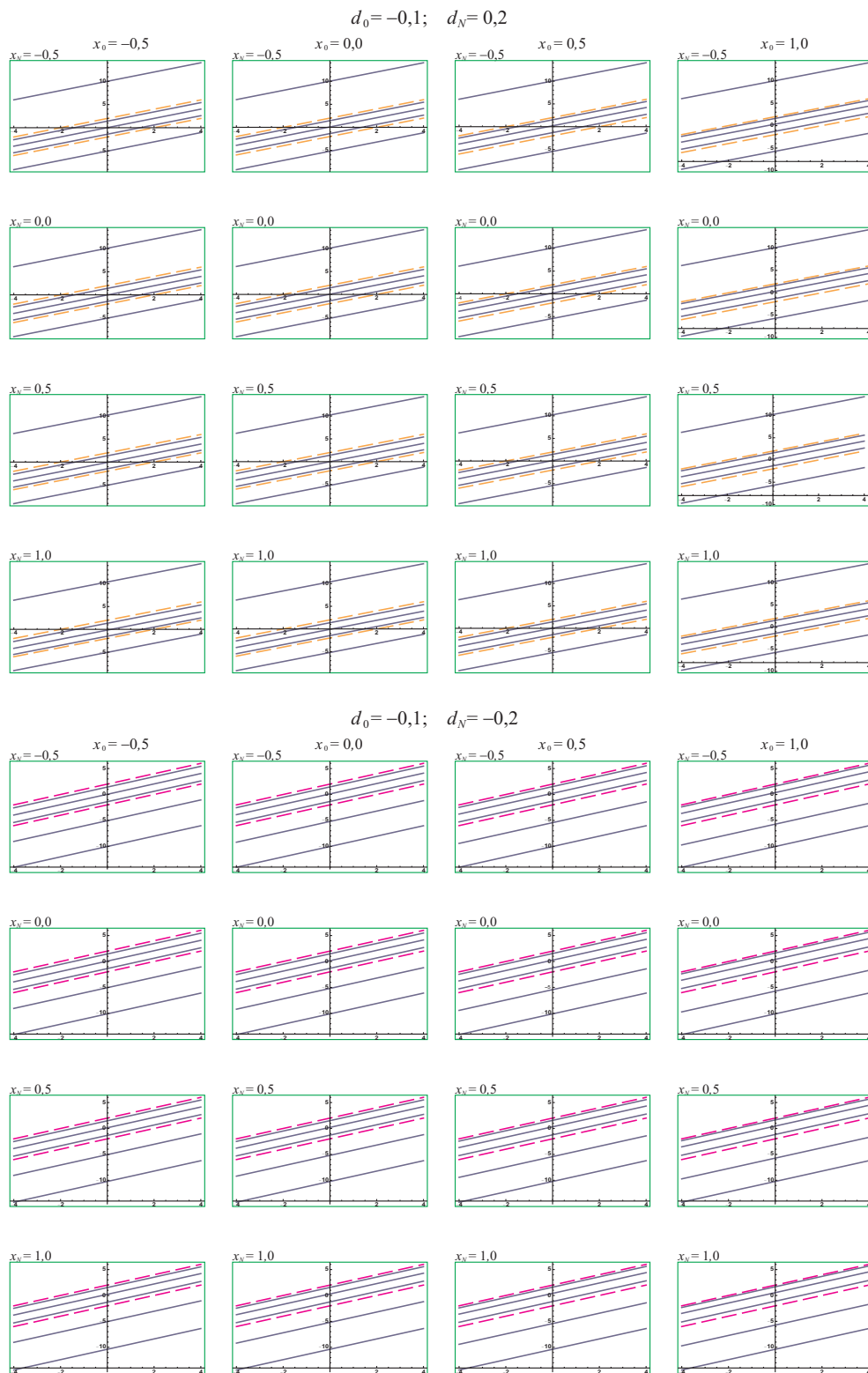
Analizom ovih grafika može se zaključiti da se povećanjem (odnosno, smanjenjem) parametra d_N , spektar mogućih eksitonskih energija širi i to pomeranjem ka višim (tj. ka nižim) energijama. Ovo pomeranje se dešava tako da se samo jedan energetski nivo „izbacuje” van balkovske zone (označene isprekidanim linijama) kada je vrednost parametara $d_N = 0,0$. Za ostale vrednosti parametara d_N , dolazi do simetričnog ili asimetričnog izbacivanja dva stanja van balkovske zone.

Ovi „izbačeni” nivoi su udaljeniji od balkovske zone što je perturbacija veća, odnosno, što je parametar d po apsolutnoj vrednosti veći.

Ovakva izdvojena stanja su poznata pod nazivom tamovska ili lokalizovana stanja [66–70, 76–79]. Ono što se ovde vidi je da se ova stanja javljaju i da su ona dislocirana iz zone dozvoljenih energija eksitona u neograničenim strukturama, ali se ne može tvrditi kolika je verovatnoća njihovog nalaženja niti gde se ona mogu pojaviti. Zbog toga će ova analiza biti posebno urađena u sledećem paragrafu.

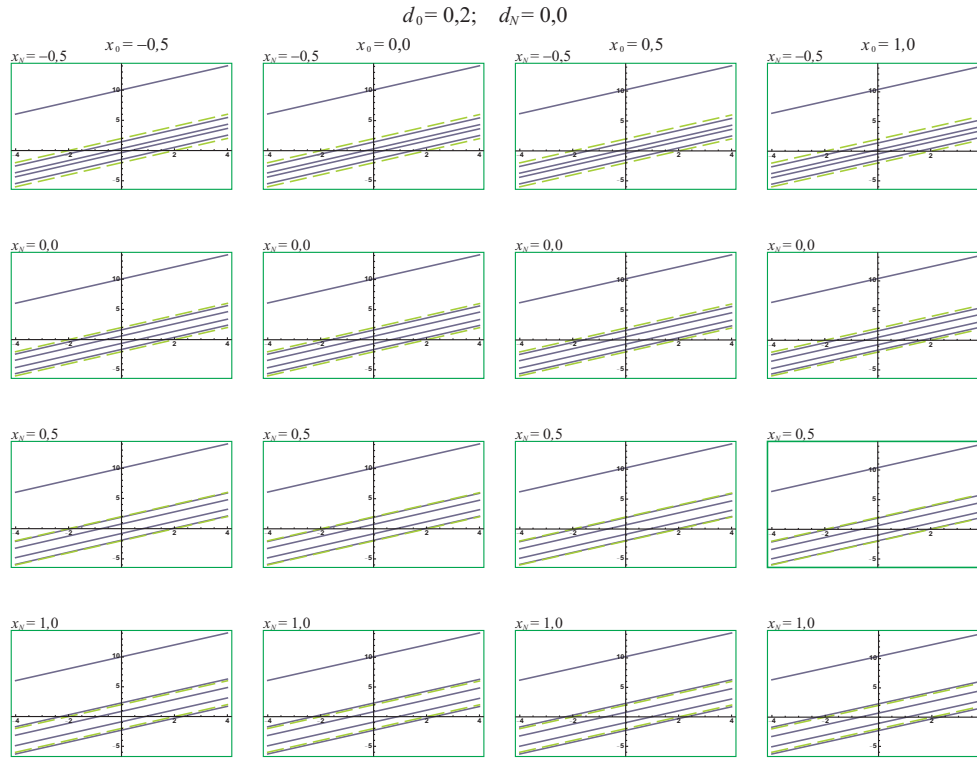


Slika 3.9: Eksitonske energije molekuskog filma



Slika 3.10: Eksitonske energije molekuskog filma

Na slikama 3.11-13 parametar $d_0 = 0,2$, dok se d_N menja od $-0,2$ do $+0,2$ u koracima od po $0,1$ ($d_N = -0,2; -0,1; 0; +0,1; +0,2$). Za svaki par parametara d_0 i d_N izmenski granični perturbacioni parametri su uzimali sledeće vrednosti: $x_{0,N} = -0,5; 0,0; +0,5; +1,0$

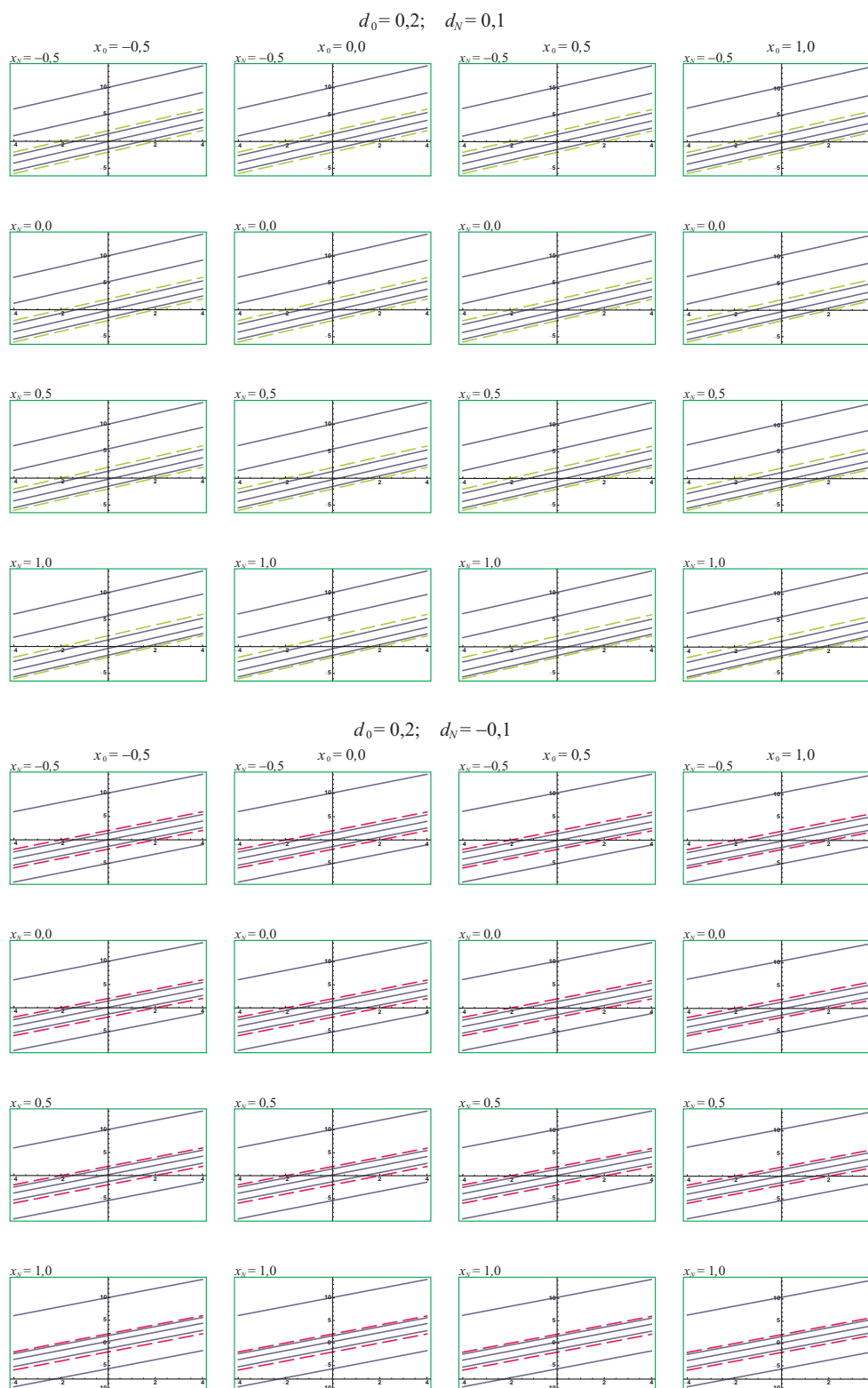


Slika 3.11: Eksitonske energije molekuskog filma

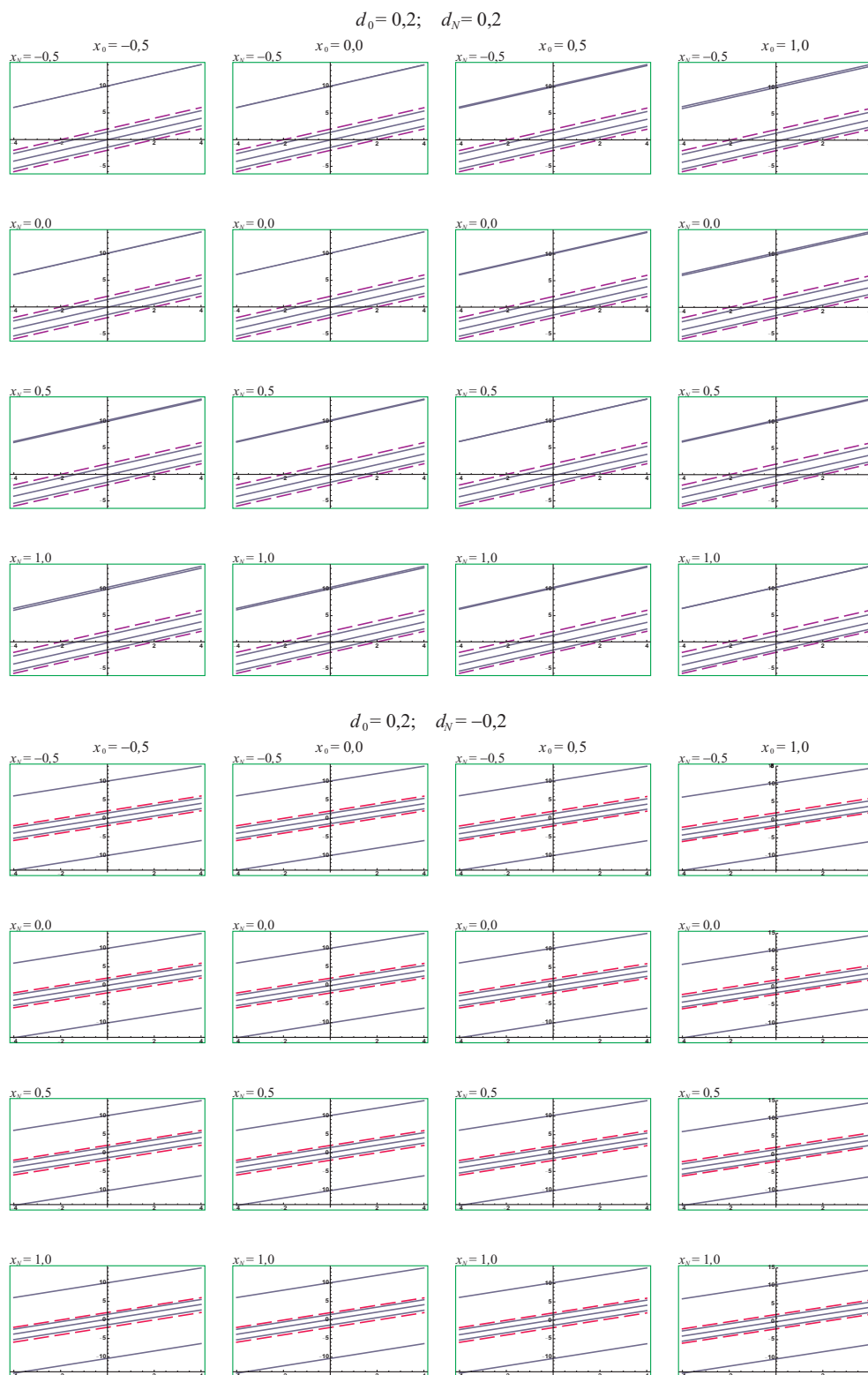
Analizom ovih grafika može se zaključiti da se povećanjem (odnosno, smanjenjem) parametra d_N , spektar mogućih eksitonskih energija širi i to pomeranjem ka višim (tj. ka nižim) energijama. Ovo pomeranje se dešava tako da se jedan ili čak tri energetska nivoa „izbacuju” van balkovske zone (označene isprekidanim linijama) kada je vrednost parametara $d_N = 0,0$. Za ostale vrednosti parametara d_N , dolazi do simetričnog ili asimetričnog izbacivanja dva ili čak četiri stanja van balkovske zone.

Ovi „izbačeni” nivoi su udaljeniji od balkovske zone što je perturbacija veća, odnosno, što je parametar d po apsolutnoj vrednosti veći.

Ovakva izdvojena stanja su poznata pod nazivom tamovska ili lokalizovana stanja [66–70, 76–79]. Ono što se ovde vidi je da se ova stanja javljaju i da su ona dislocirana iz zone dozvoljenih energija eksitona u neograničenim strukturama, ali se ne može tvrditi kolika je verovatnoća njihovog nalaženja niti gde se ona mogu pojaviti. Zbog toga će ova analiza biti posebno urađena u sledećem paragrafu.

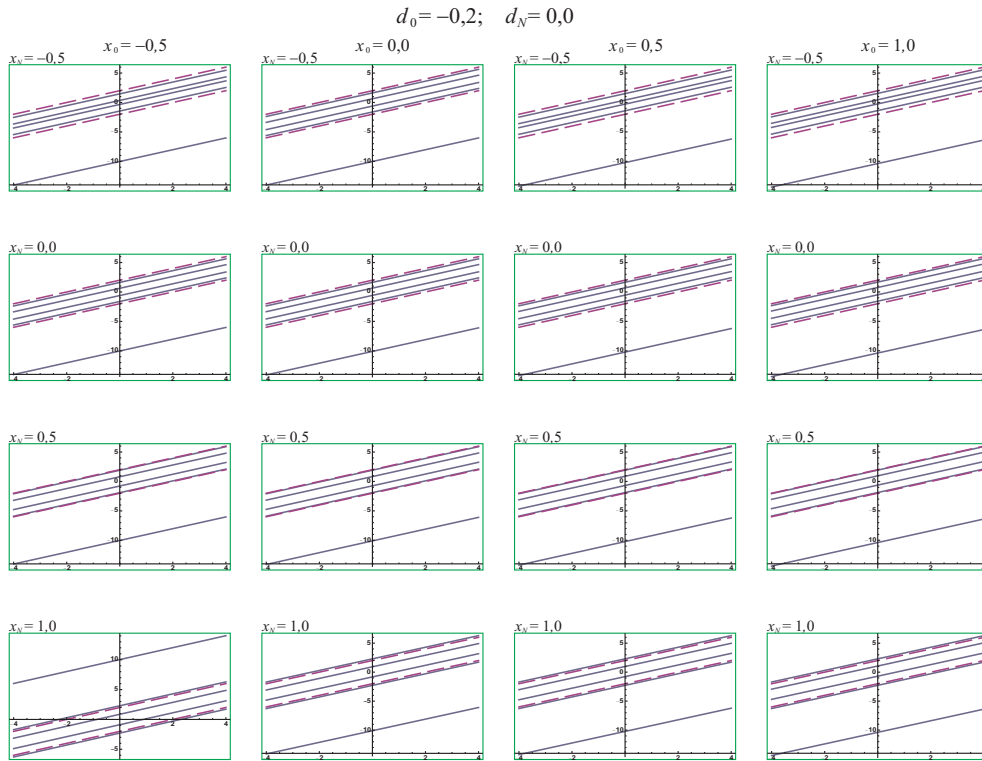


Slika 3.12: Eksitonske energije molekularnog filma



Slika 3.13: Eksitonske energije molekuskog filma

Na slikama 3.14-16 parametar $d_0 = -0,2$, dok se d_N menja od $-0,2$ do $+0,2$ u koracima od po $0,1$ ($d_N = -0,2; -0,1; 0; +0,1; +0,2$). Za svaki par parametara d_0 i d_N izmjeniski granični perturbacioni parametri su uzimali sledeće vrednosti: $x_{0,N} = -0,5; 0,0; +0,5; +1,0$

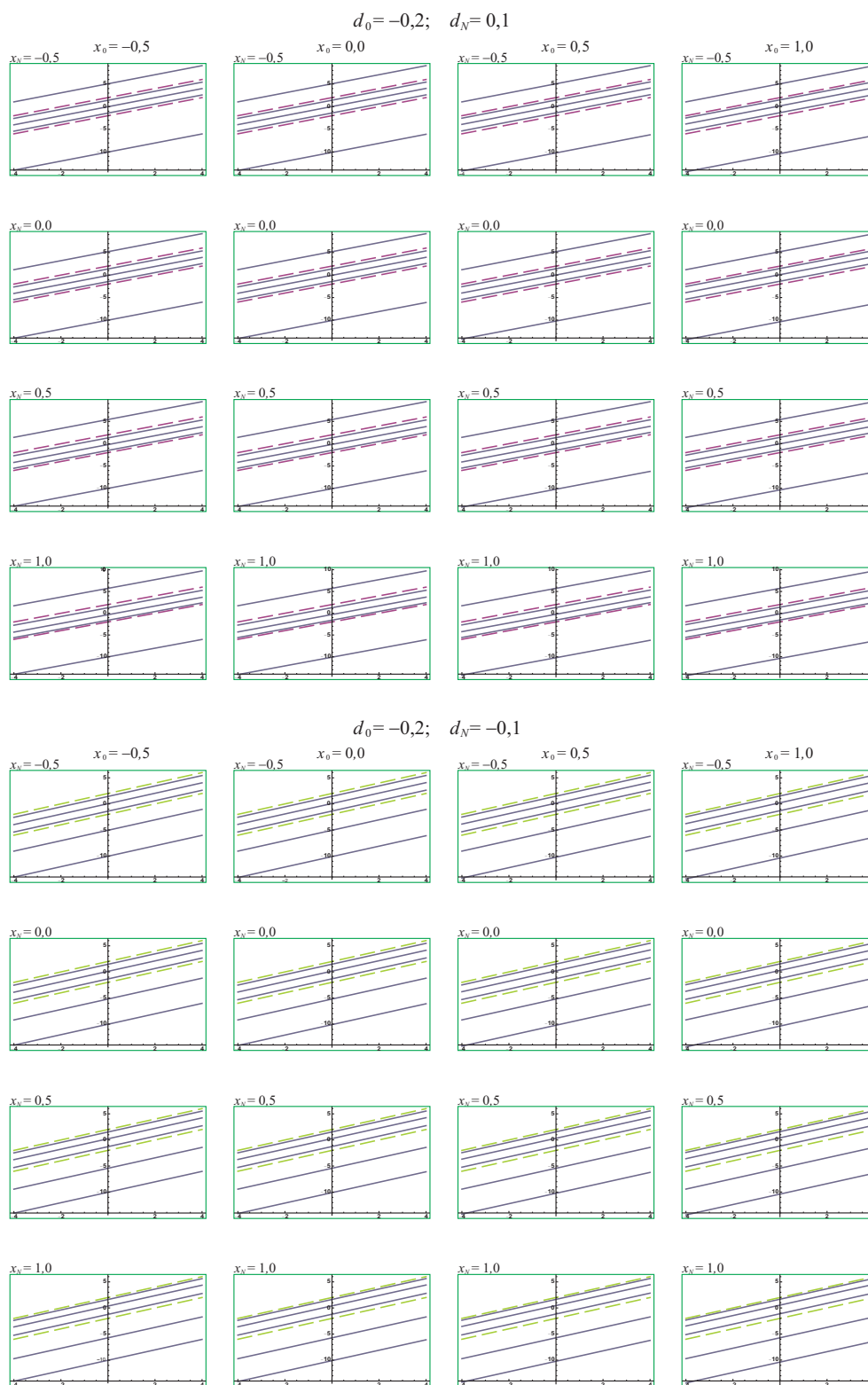


Slika 3.14: Eksitonske energije molekuskog filma

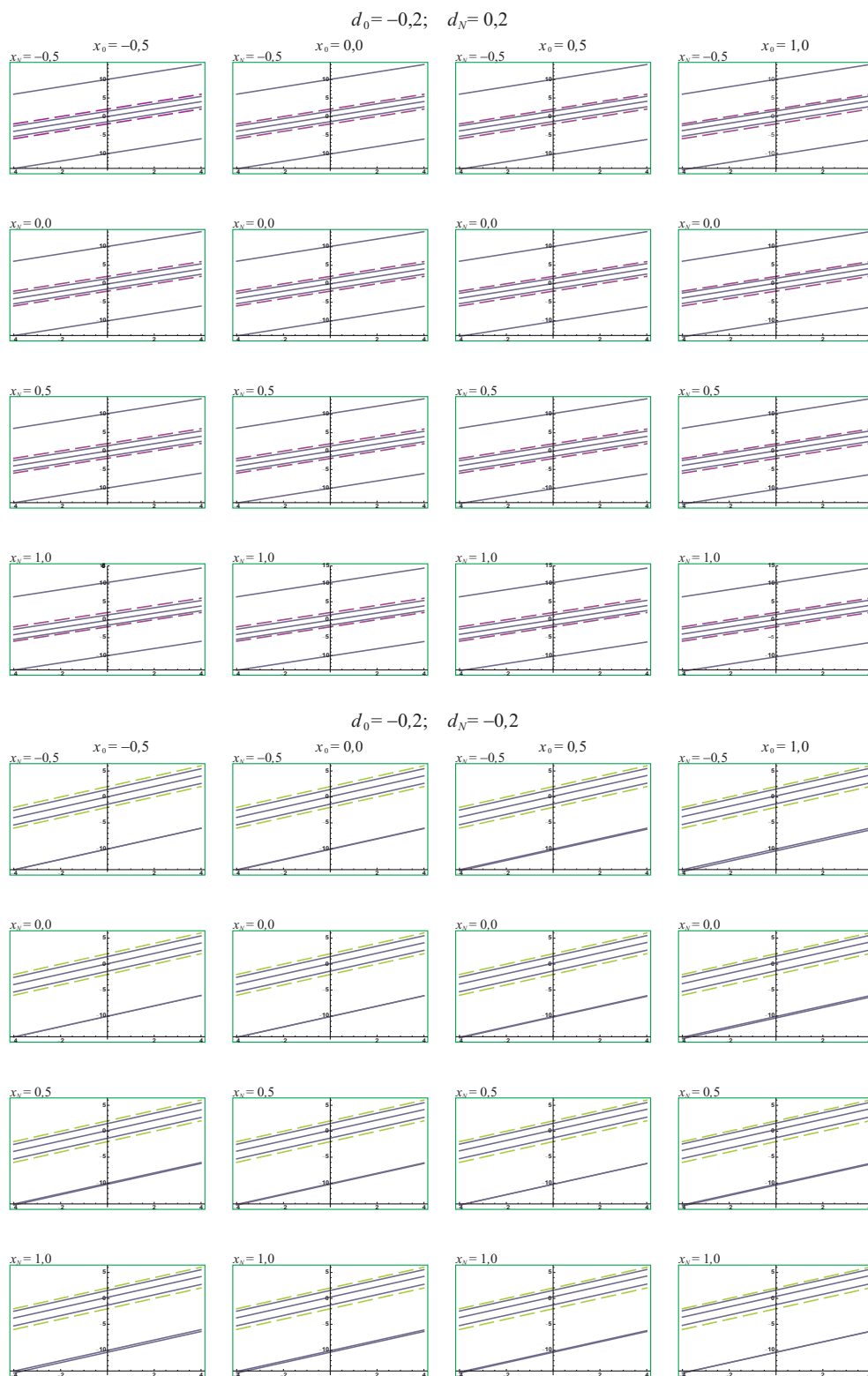
Analizom ovih grafika može se zaključiti da se povećanjem (odnosno, smanjenjem) parametra d_N , spektar mogućih eksitonskih energija širi i to pomeranjem ka višim (tj. ka nižim) energijama. Ovo pomeranje se dešava tako da se jedan ili čak tri energetska nivoa „izbacuju” van balkovske zone (označene isprekidanim linijama) kada je vrednost parametara $d_N = 0,0$. Za ostale vrednosti parametara d_N , dolazi do simetričnog ili asimetričnog izbacivanja dva ili čak četiri stanja van balkovske zone.

Ovi „izbačeni” nivoi su udaljeniji od balkovske zone što je perturbacija veća, odnosno, što je parametar d po apsolutnoj vrednosti veći.

Ovakva izdvojena stanja su poznata pod nazivom tamovska ili lokalizovana stanja [66–70, 76–79]. Ono što se ovde vidi je da se ova stanja javljaju i da su ona dislocirana iz zone dozvoljenih energija eksitona u neograničenim strukturama, ali se ne može tvrditi kolika je verovatnoća njihovog nalaženja niti gde se ona mogu pojaviti. Zbog toga će ova analiza biti posebno urađena u sledećem paragrafu.



Slika 3.15: Eksitonske energije molekuskog filma



Slika 3.16: Eksitonske energije molekuskog filma

Analizom svih prethodnih grafika može se zaključiti da se povećanjem parametara $x_{0,N}$, spektar mogućih eksitonskih energija simetrično širi i to jednakim pomeranjem ka višim i nižim energijama. Ovo širenje se dešava tako da se istovremeno dva ili čak četiri energetska nivoa „izbacuju” van balkovske zone (označene isprekidanim linijama). Ovi nivoi – lokalizovana stanja su udaljenija od balkovske zone što je perturbacija veća, odnosno, što su parametri $x_{0,N}$ veći. I ovde se vidi je da se ova stanja javljaju i da su ona dislocirana iz zone dozvoljenih energija eksitona u neograničenim strukturama, ali se ne može tvrditi kolika je verovatnoća njihovog nalaženja niti gde se ona mogu pojaviti. Zbog toga će i ova analiza biti posebno urađena u sledećem paragrafu.

Smanjenjem parametara $x_{0,N}$ dolazi do nezatnog približavanja unutrašnjih energetske nivoa, dok širina celog spektra ostaje skoro nepromenjena.

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

Na slici 3.2 postoje grafici kod kojih su vrednosti perturbacionih parametara jednaki nuli. Oni predstavljaju moguće energije eksitona neperturbovanog molekuskog filma. U literaturi ovakva film-struktura naziva se idealan film¹¹ [66–70]. Ove strukture su zanimljive zbog toga što se tu energetske spektri elementarnih pobuđenja mogu izraziti u analitičkom obliku [76–79].

¹¹U slučaju idealnog filma granični parametri su: $d_0 = d_N = 0$; $x_0 = x_N = 0$, tako da determinanta (3.8) prelazi u:

$$\mathcal{D}_{N+1}(\varrho) = \begin{vmatrix} \varrho & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & \varrho & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \varrho & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \ddots & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & \varrho & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & \varrho & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & \varrho \end{vmatrix}_{N+1}$$

Poznato je da rešenja ove determinante predstavljaju Čebiševljevi polinom [71–73]:

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

gde Čebiševljevi polinomi zadovoljavaju poznatu rekurentnu relaciju oblika: $\mathcal{C}_{n+1}(x) = x\mathcal{C}_n(x) - \mathcal{C}_{n-1}(x)$. Iz uslova (3.7), tj. za $\mathcal{C}_{N+1} \equiv 0$, dobija se: $\zeta_\nu = \frac{\pi \nu}{N+2}$ $\nu = 1, 2, 3, \dots, N+1$. Na osnovu ovoga i jednačine smene (3.6) nalazimo:

$$\hbar\omega_\nu = \Delta - 2|X| \left(\cos ak_x + \cos ak_y - \cos \frac{\pi\nu}{N+2} \right).$$

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

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

Prethodni izraz predstavlja zakon disperzije eksitona idealnog molekuskog filma (prikazan je na gornjim graficima 3.2 i 3.3) i ima istu formu kao izraz (2.30) dobijen za odgovarajuće idealne neograničene strukture, s razlikom što je tamo k_z praktično kontinualno promenljivo (u intervalu $[0, \pi/a]$) kao što su k_x i k_y , a ovde je diskretno i dato je izrazom:

$$k_z(\mu) = \frac{\pi}{a} \frac{\mu}{N+2}.$$

gde je uvedena smena indeksa $\mu = N+1-\nu$, $\mu = 1, 2, 3, \dots, N+1$.

3.3 Kritične vrednosti i fazni prelazi

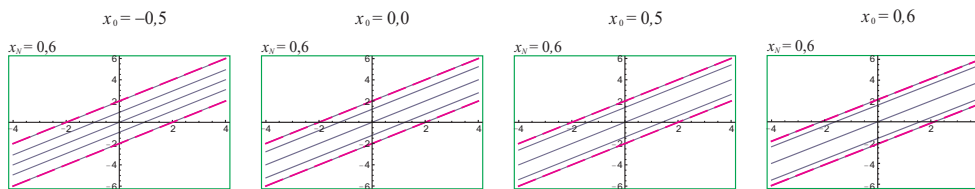
Fazni prelazi iz balkovskih u lokalizovana stanja pojavljuju se samo za određene vrednosti parametara $d_{0/N}$ i $x_{0/N}$. To su takozvane kritične vrednosti ovih parametara pri kojima dolazi do pojave jednog, dva, tri pa čak i četiri lokalizovana stanja. Naravno da je ova analiza važeća samo u posmatranom slučaju četvoroslojnog filma: $N_z = 4$, tj. kod filma sa pet kristalografskih ravni duž z-pravca: $N_z + 1 = 5$) i za izabrane oblasti mogućih promena perturbacionih parametara: $d \in [-0, 2; +0, 2]$ i $x \in [-0, 5; +1, 0]$.

Za slučaj kada parametri d imaju sledeće vrednosti $d_0 = d_N = 0, 0$, tj. u slučaju idealnog filma, tačnije rečeno: slabo-perturbovanog filma, mogu da se pojave dva lokalizovana stanja pri određenim vrednostima parametra $x_{0/N}$ (što je i prikazamo u tabeli 3.1 i na slici 3.17) ili čak četiri samo za najveće pozitivne vrednosti $x_{0/N}$ parametara, te se te vrednosti mogu nazvati kritične granične vrednosti.

BALK – DVA LOKALIZOVANA STANJA				
x_N	0,60	0,60	0,60	0,60
x_0	0,50	0,00	0,50	0,60

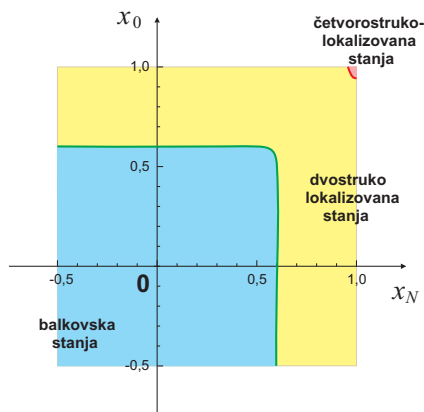
Tabela 3.1: Kritične vrednosti parametara $x_{0/N}$ kada su $d_0 = 0, 0$ i $d_N = 0, 0$

$$d_0 = 0,0; \quad d_N = 0,0$$



Slika 3.17: Kritične vrednosti parametara $x_{0/N}$ za prelaz u dva lokalizovana stanja

U faznom dijagramu: $x_0 = x_0(x_N)$, koja je prikazana na slici 3.18, vrednosti kritičnih parametara $x_{0/N}$ iz tabele 3.1, tj. sa slike 3.17, predstavljaju liniju faznih prelaza iz oblasti sa samo balkovskim stanjima u oblast egzistencije dva lokalizovana (i tri balkovska) stanja. Uokvirena veoma mala oblast u gornjem desnom uglu ove slike predstavlja posebnu tačku za vrednosti $x_0 = x_N = +1, 0$ kada se javljaju četiri lokalizovana stanja, a eksitoni se u takvoj ultratankoj film-strukturi pojavljuju u samo jednom balkovskom stanju.



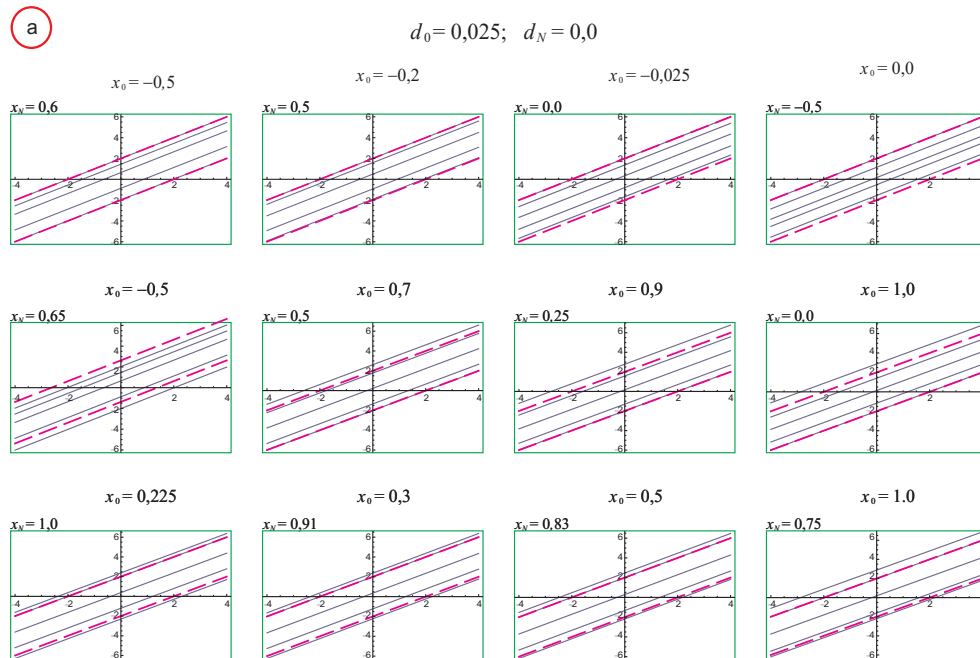
Slika 3.18: Fazni dijagram vrednosti parametara $x_{0/N}$ kada su $d_0 = 0, 0$ i $d_N = 0, 0$

Kritične vrednosti parametara d pri kojima dolazi do pojave jednog, dva i/ili tri lokalizovana stanja su $d_0 = \pm 0,025$ i $d_N = 0,0$ (ili obrnuto!). Vrednosti za parametre $x_{0/N}$ pri kojima dolazi do ovih pojava prikazane su u tabeli 3.2 i na slikama 3.19a/b.

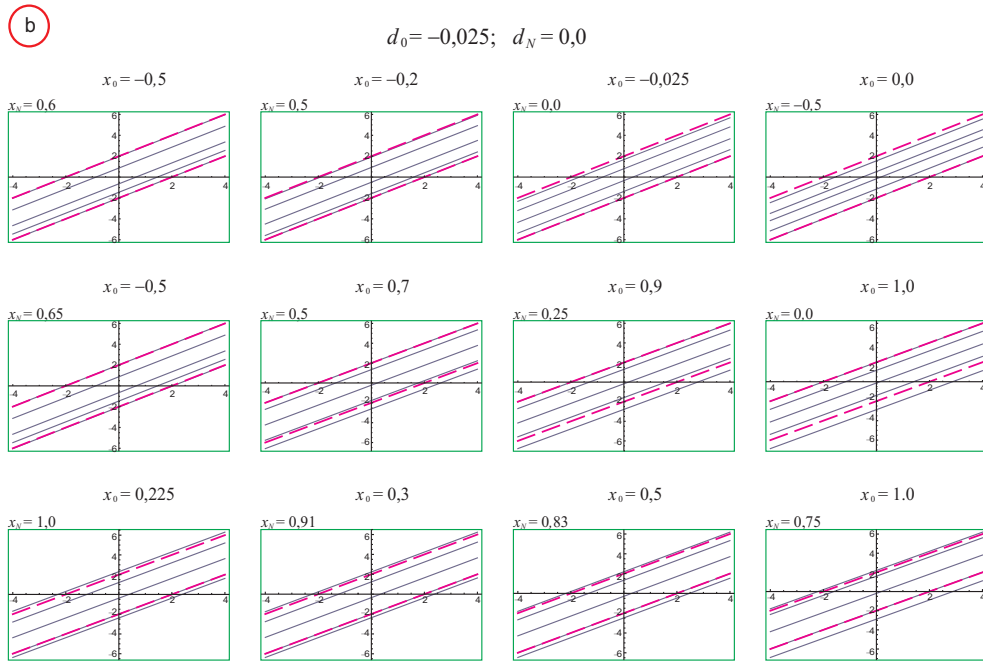
U ovom slučaju može da se javi oblast sa jednim lokalizovanim ili van-balkovskim stanjem (i sa četiri balkovska stanja), a potom se za veće vrednosti parametara x , prelazi u oblast sa dva lokalizovana (i tri balkovska) stanja i, na kraju – iz dva u tri lokalizovana (sa dva balkovska) stanja. Na slici 3.20 prikazane su tri linije ovih faznih prelaza sa četiri oblasti egzistencija odgovarajućeg broja lokalizovanih eksitonskih stanja.

BALK – JEDNO LOKALIZOVANO STANJE				
x_N	0,600	0,500	0,000	- 0,500
x_0	- 0,500	- 0,200	- 0,025	0,000
JEDNO – DVA LOKALIZOVANA STANJA				
x_N	0,650	0,500	0,250	1,000
x_0	- 0,500	0,700	0,900	0,000
DVA – TRI LOKALIZOVANA STANJA				
x_N	1,000	0,910	0,830	0,750
x_0	0,225	0,300	0,500	1,000

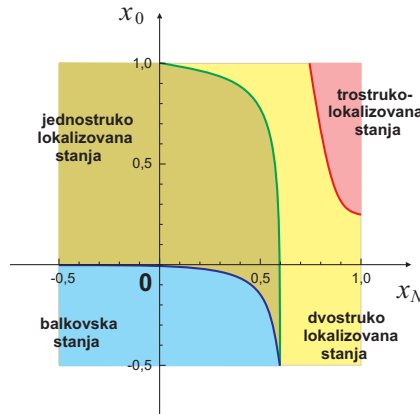
Tabela 3.2: Kritične vrednosti parametara $x_{0/N}$ kada su $d_0 = \pm 0,025$ i $d_N = 0,0$ (ili obrnuto)



Slika 3.19: Kritične vrednosti parametara $x_{0/N}$ za prelaz u jedno, dva ili tri lokalizovana stanja



Slika 3.19: Kritične vrednosti parametara $x_{0/N}$ za prelaz u jedno, dva ili tri lokalizovana stanja



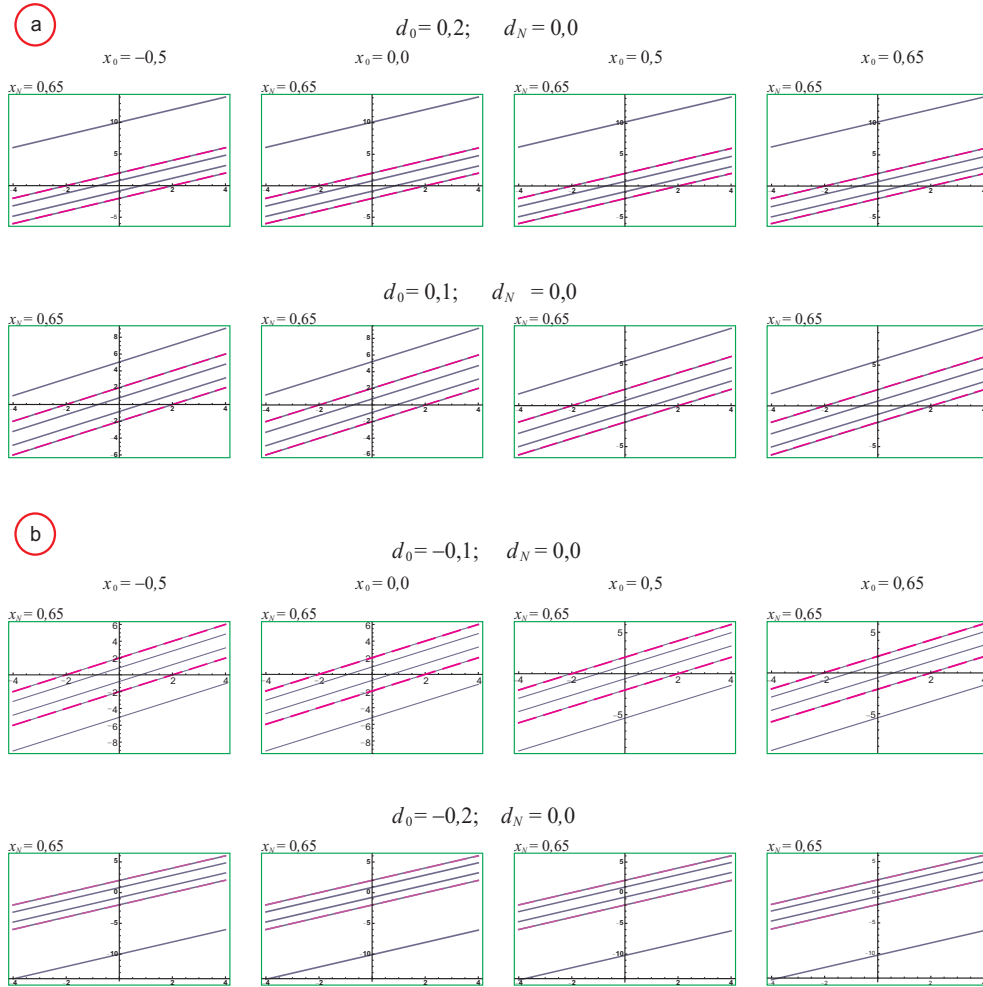
Slika 3.20: Fazni dijagram vrednosti parametara $x_{0/N}$ za $d_0 = \pm 0,025$ i $d_N = 0,0$ (ili obrnuto)

Pojavu prelaza iz jednog u tri lokalizovana stanja primećujemo za vrednosti $d_0 = \pm 0,1$ i $d_N = 0,0$ (ili obrnuto!), kao i za $d_0 = \pm 0,2$ i $d_N = 0,0$ (ili obrnuto!). Vrednosti koje u ovom sluaju imaju parametri x date su u tabeli 3.3 i na slikama 3.21a/b.

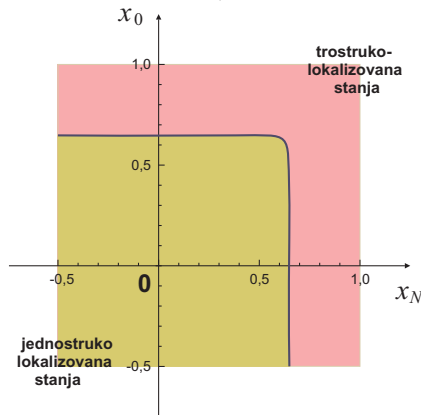
JEDNO – TRI				
LOKALIZOVANA STANJA				
x_N	0,65	0,65	0,65	0,65
x_0	- 0,50	0,00	0,50	0,65

Tabela 3.3: Kritične vrednosti parametara $x_{0/N}$ za $d_0 = \pm 0,1$, tj. $d_0 = \pm 0,2$ i $d_N = 0,0$

U ovom slučaju uvek se javlja barem jedno lokalizovano ili van-balkovsko stanje (i četiri balkovska stanja), a potom se za veće vrednosti parametara x , prelazi odmah u oblast sa tri lokalizovana (i dva balkovska) stanja bez prelaska u oblast sa dva lokalizovana (i tri balkovska) stanja. Na slici 3.22 prikazane su dve linije ovih faznih prelaza sa tri oblasti egzistencija odgovarajućeg broja lokalizovanih eksitonskih stanja.



Slika 3.21: Kritične vrednosti parametara $x_{0/N}$ za prelaz jednog u tri lokalizovana stanja



Slika 3.22: Fazni dijagram vrednosti parametara $x_{0/N}$ za $d_0 = \pm 0, 1$, tj. $d_0 = \pm 0, 2$ i $d_N = 0, 0$

3.4 Spektralne težine eksitonskih stanja

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

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

gde su: $\hat{\mathcal{D}}_{N+1}$ – matrica koja odgovara determinanti sistema \mathcal{D}_{N+1} , a $\tilde{\mathcal{G}}_{N+1}$ i $\tilde{\mathcal{K}}_{N+1}$ – vektori Grinovih funkcija i Kronekerovih delti [66–70,77–79]:

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

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

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

Kako se inverzna matrica može izraziti preko adjugovane, čiji su članovi D_{ik} kofaktori elementa d_{ik} direktne matrice [71–73], može se pisati:

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

Kofaktori D_{n_z,m_z} se izračunavaju na osnovu poznavanja determinante sistema \mathcal{D}_{N+1} .

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

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

gde su: $B_0 = B_{N-N} = 1$,

$$B_{n_z}(\varrho) = \begin{vmatrix} \varrho + \frac{\Delta}{|X|}d_0 & 1+x_0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 1+x_0 & \varrho & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \varrho & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \varrho & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & \varrho & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & \varrho \end{vmatrix}_{n_z} \quad (3.13)$$

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

U opštem slučaju, vrednost pomoćnih determinanti se može naći numerički, dok su Grinove funkcije perturbovanog filma [66–70,77–79]:

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

Grinove funkcije su multipolne, jer se u imeniocu nalazi polinom \mathcal{D}_{N+1} reda $N + 1$. Stoga se mora pribeći faktorizaciji na proste polove [80–82]:

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

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

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

Spektralne težine Grinovih funkcija predstavljaju kvadrat modula talasne funkcije eksitona [80–82] 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.¹²

U sledećim tabelama i graficima koji slede iza toga, predstavljene su vrednosti redukovanih energija i njima odgovarajućih spektralnih funkcija (prostorna raspodela verovatnoća) za petoslojni film. U slučaju perturbovanog filma, spektralne težine za date eksitonske energije se mogu naći samo numeričkim metodama. Rezultati dobijeni za različite vrednosti perturbovanih parametara filma dati su u tabelama 3.4–3.11 i slikama 3.23–3.29 (pri čemu je $k_x = k_y = 0$).¹³ Treba napomenuti da su ovde izabrani samo karakteristični slučajevi, oni kod kojih dolazi do faznih prelaza (obrađenih u prethodnom paragrafu).

¹²Time je dat jasan kriterijum za razlikovanje kolektivnih, zapreminskih (balk) eksitacija (koje su opisane ravnim i/ili stojećim talasima i imaju približno istu verovatnoću nalaženja duž celog preseka filma) od lokalizovanih eksitacija na graničnim površima (čije spektralne težine pokazuju oštar maksimum na graničnom perturbovanom sloju i naglo opadaju u unutrašnjosti filma). Uobičajena periodična zavisnost u obliku ravnog talasa e^{ikn} za zapreminska stanja, postaje opadajuća eksponencijalna zavisnost $e^{-\kappa n}$ za lokalizovana stanja, gde je osnovni uslov $\kappa \geq 0$ [76–79, 83–85]. Kao što je napred rečeno, uslov da talasni vektor κ poprimi imaginarne vrednosti $\kappa = -ik$, svodi se na uslov $|\varrho| \geq 2$ [66–70], koji ukazuje na to da se energije lokalizovanih stanja nalaze van kontinualne zone balkovskih eksitonskih energija.

¹³Iz svih ovih tabela i slika može se jasno uočiti da se na svakom čvoru kristalnog sloja nalazi tačno jedan eksiton, koji može biti u $N + 1 = 5$ različitih energetskih stanja, sa različitim verovatnoćama nalaženja. Za proizvoljan broj slojeva filma ($N + 1$) važi sledeća relacija, koja ukazuje na to da je zbir svih verovatnoća nalaženja eksitona jednak broju mogućih stanja:

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

Tabela 3.4 daje prostornu distribuciju verovatnoća javljanja eksitonskih energija u idealnom molekulskom filmu¹⁴

Redukovana relativna ENERGIJA	$d_0 = 0, 0; d_N = 0, 0; x_0 = 0, 0; x_N = 0, 0$				
	0. ravan	1. ravan	2. ravan	3. ravan	4. ravan
-1,00000	0,25000	0,25000	0,00000	0,25000	0,25000
0,00000	0,33333	0,00000	0,33333	0,00000	0,33333
1,00000	0,25000	0,25000	0,00000	0,25000	0,25000
1,73205	0,08333	0,25000	0,33333	0,25000	0,08333

Tabela 3.4: Verovatnoće nalaženja eksitona u idealnom petoslojnom filmu

¹⁴U slučaju idealnog (neperturbovanog) filma, pomoćne determinante B_{n_z-1} i B_{N-n_z} se svode na Čebiševljeve polinome C_{n_z} i C_{N-n_z} . Tada je Grinova funkcija idealnog filma [77–80]:

$$G_{n_z} = \frac{i\hbar}{2\pi|X|} \frac{C_{n_z} C_{N-n_z}}{C_{N+1}},$$

dok je:

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

U idealnom filmu egzistiraju samo zapreminska eksitonska stanja. Verovatnoće nalaženja se mogu naći analitički. Korišćenjem pravila za izvod determinante [66–70] dobija se:

$$\left[\frac{d}{d\varrho} C_{N+1}(\varrho) \right]_{\varrho=\varrho_\nu} = \sum_{i=1}^{N+1} C_{i-1}(\varrho_\nu) C_{N+1-i}(\varrho_\nu) = \sum_{i=1}^{N+1} \frac{\sin i\xi_\nu \sin(N+2-i)\xi_\nu}{\sin^2 \xi_\nu}.$$

Spektralne težine postaju:

$$g_{n_z}^\nu = \frac{\sin(n_z+1)\xi_\nu \sin(N-n_z+1)\xi_\nu}{\sum_{i=1}^{N+1} \sin i\xi_\nu \sin(N+2-i)\xi_\nu}.$$

Uvođenjem smene $\xi_\nu = \frac{\pi\nu}{N+2}$ sledi:

$$g_{n_z}^\nu = \frac{\sin^2(n_z+1)\xi_\nu}{\sum_{i=1}^{N+1} \sin^2 i\xi_\nu}.$$

Suma u imeniocu se može rešiti primenom poznatog razvoja u red [77–79]:

$$\sum_{k=1}^m \sin^2 kx = \frac{m}{2} - \frac{\cos(m+1)x \sin mx}{2 \sin x}.$$

Dobija se:

$$\sum_{i=1}^{N+1} \sin^2 i\xi_\nu = \frac{N+2}{2}.$$

Verovatnoće nalaženja eksitona su tada:

$$g_{n_z}^\nu = \frac{2}{N+2} \sin^2 \left[(n_z+1) \frac{\pi\nu}{N+2} \right].$$

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

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

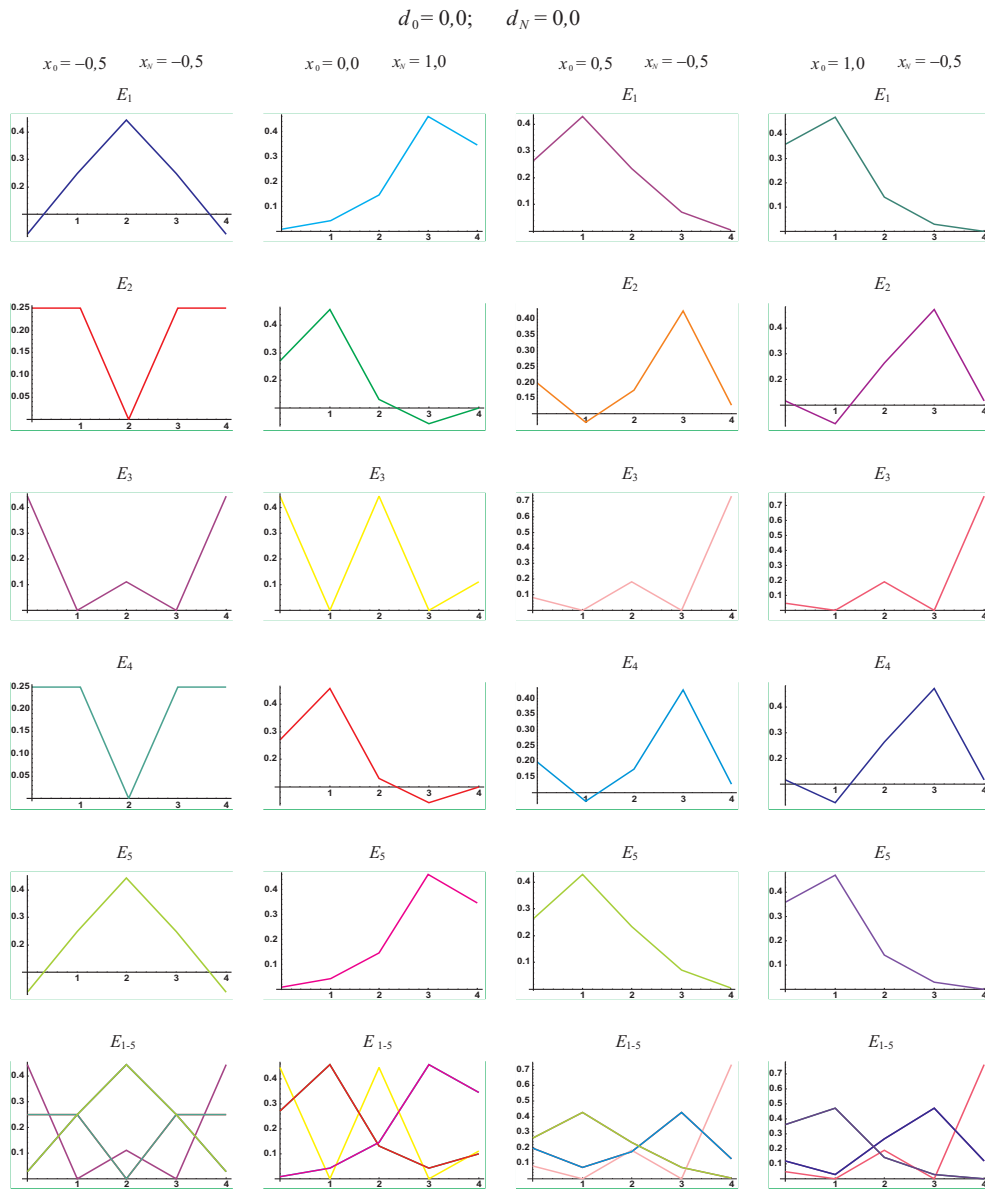
U tabeli 3.5 i na slici 3.23 prikazane su prostorne verovatnoće nalaženja eksitona u petoslojnom molekulskom filmu i to za slučaj kada parametri uzimaju sledeće vrednosti: $d_0 = 0, 0$; $d_N = 0, 0$; $x_0 \in [-0, 5; /, 1, 0]$; $x_N = -0, 5; /, 1, 0$.

Redukovana relativna ENERGIJA	$d_0 = 0, 0; d_N = 0, 0; x_0 = -0, 5; x_N = -0, 5$				
	0. ravan	1. ravan	2. ravan	3. ravan	4. ravan
-1,50000	0,02778	0,25000	0,44444	0,25000	0,02778
-0,50000	0,25000	0,25000	0,00000	0,25000	0,25000
0,00000	0,44444	0,00000	0,11111	0,00000	0,44444
0,50000	0,25000	0,25000	0,00000	0,25000	0,25000
1,50000	0,02778	0,25000	0,44444	0,25000	0,02778
Redukovana relativna ENERGIJA	$d_0 = 0, 0; d_N = 0, 0; x_0 = 0, 0; x_N = 1, 0$				
	0. ravan	1. ravan	2. ravan	3. ravan	4. ravan
-2,30278	0,00792	0,04199	0,14659	0,45801	0,34549
-1,30278	0,26986	0,45801	0,13118	0,04199	0,09896
0,00000	0,44444	0,00000	0,44444	0,00000	0,11111
1,30278	0,26986	0,45801	0,13118	0,04199	0,09896
2,30278	0,00792	0,04199	0,14659	0,45801	0,34549
Redukovana relativna ENERGIJA	$d_0 = 0, 0; d_N = 0, 0; x_0 = 0, 5; x_N = -0, 5$				
	0. ravan	1. ravan	2. ravan	3. ravan	4. ravan
-1,91421	0,26206	0,42678	0,23294	0,07322	0,00500
-0,91421	0,19712	0,07322	0,17522	0,42678	0,12766
0,00000	0,08163	0,00000	0,18367	0,00000	0,73469
0,91421	0,19712	0,07322	0,17533	0,42678	0,12766
1,91421	0,26206	0,42678	0,23294	0,07322	0,00500
Redukovana relativna ENERGIJA	$d_0 = 0, 0; d_N = 0, 0; x_0 = 1, 0; x_N = -0, 5$				
	0. ravan	1. ravan	2. ravan	3. ravan	4. ravan
-2,29129	0,35854	0,47059	0,14006	0,02941	0,00140
-1,00000	0,11765	0,02941	0,26471	0,47059	0,11765
0,00000	0,04762	0,00000	0,19048	0,00000	0,76190
1,00000	0,11765	0,02941	0,26471	0,47059	0,11765
2,29129	0,35854	0,47059	0,14006	0,02941	0,00140

Tabela 3.5: Verovatnoće nalaženja eksitona u perturbovanom petoslojnom filmu

Energije čije vrednosti se nalaze izvan balkovske zone (tj. lokalizovana eksitonska stanja), kao i najveće vrednosti verovatnoća (po slojevima filma) za te energije, su prikazani podebljanim brojevima. Povećanjem parametara $x_{0/N}$ do 100 % (tabele 3.5) vidi se da se prostorna lokalizacija, tj. verovatnoća nalaženja eksitona, srazmerno povećava upravo na prvoj unutrašnjoj ravni filma.

Na slici 3.23 dati su grafici prostorne distribucije verovatnoća odgovarajućih energija po ravnima filma, a u donjem redu prikazani su zbirni grafici za sve distribucije energija. Sa ovih grafika lepo se vide da su najveće verovatnoće nalaženja eksitona u unutrašnjem sloju filma i za vanbalkovske vrednosti eksitonskih energija.



Slika 3.23: Verovatnoće nalaženja eksitona u perturbovanom petoslojnom filmu

U tabeli 3.6 i na slici 3.24 prikazane su prostorne verovatnoće nalaženja eksitona u petoslojnom molekulskom filmu i to za slučaj kada parametri uzimaju sledeće vrednosti: $d_0 = 0, 0$; $d_N = 0, 1$; $x_0 \in [-0, 5; 1, 0]$; $x_N = -0, 5$.

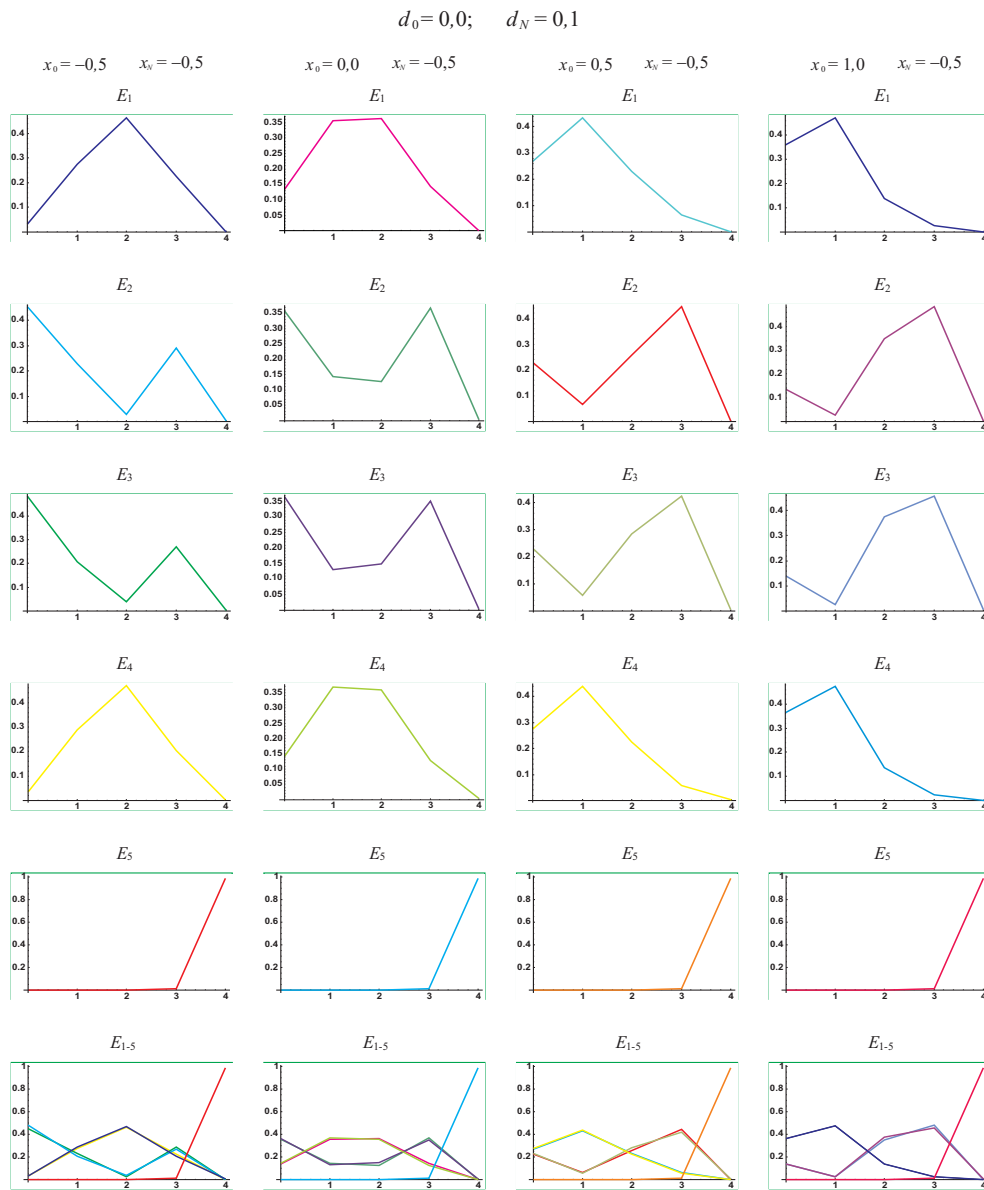
Redukovana relativna ENERGIJA	$d_0 = 0, 0$; $d_N = 0, 1$; $x_0 = -0, 5$; $x_N = -0, 5$				
	0. ravan	1. ravan	2. ravan	3. ravan	4. ravan
-1,46903	0,03189	0,27531	0,46444	0,22700	0,00136
-0,35569	0,45221	0,22884	0,02758	0,28885	0,00252
0,32761	0,48130	0,20663	0,03919	0,26979	0,00209
1,44551	0,03460	0,28920	0,46834	0,20382	0,00403
5,05159	0,00000	0,00002	0,00045	0,01053	0,98900
Redukovana relativna ENERGIJA	$d_0 = 0, 0$; $d_N = 0, 1$; $x_0 = 0, 0$; $x_N = -0, 5$				
	0. ravan	1. ravan	2. ravan	3. ravan	4. ravan
-1,62336	0,13551	0,35712	0,36240	0,14414	0,00082
-0,63423	0,35784	0,14395	0,12786	0,36746	0,00289
0,59774	0,36404	0,13007	0,15037	0,35099	0,00453
1,60826	0,14260	0,36884	0,35893	0,12687	0,00276
5,05160	0,00000	0,00002	0,00045	0,01053	0,98900
Redukovana relativna ENERGIJA	$d_0 = 0, 0$; $d_N = 0, 1$; $x_0 = 0, 5$; $x_N = -0, 5$				
	0. ravan	1. ravan	2. ravan	3. ravan	4. ravan
-1,90764	0,26874	0,43465	0,23047	0,06580	0,00034
-0,80628	0,22758	0,06575	0,25891	0,44447	0,00330
0,76188	0,22931	0,05916	0,28408	0,42159	0,00587
1,90044	0,27437	0,44042	0,22610	0,05761	0,00170
5,05160	0,00000	0,00002	0,00045	0,01053	0,98899
Redukovana relativna ENERGIJA	$d_0 = 0, 0$; $d_N = 0, 1$; $x_0 = 1, 0$; $x_N = -0, 5$				
	0. ravan	1. ravan	2. ravan	3. ravan	4. ravan
-2,28917	0,36093	0,47284	0,13880	0,02730	0,00013
-0,89434	0,13674	0,02734	0,35009	0,48236	0,00347
0,84597	0,13875	0,02482	0,37416	0,45567	0,00660
2,28592	0,36358	0,47497	0,13650	0,02414	0,00082
5,05161	0,00000	0,00003	0,00045	0,01054	0,98898

Tabela 3.6: Verovatnoće nalaženja eksitona u perturbovanom petoslojnom filmu

Energije čije vrednosti se nalaze izvan balkovske zone (tj. lokalizovana eksitonska stanja), kao i najveće vrednosti verovatnoća (po slojevima filma) za te energije, su prikazani podebljanim brojevima. Povećanjem parametara $d_{0/N}$ do 10 % (gornje tabele 3.6) vidi se da se prostorna lokalizacija, tj. verovatnoća nalaženja eksitona, srazmerno povećava upravo na gornjoj/donjoj graničnoj ravni filma gde se i javlja jedno lokalizovano eksitonsko stanje.

Povećanjem parametara $x_{0/N}$ do 100 % (donje tabele 3.6) vidi se da se prostorna lokalizacija, tj. verovatnoća nalaženja eksitona, srazmerno povećava upravo na prvoj unutrašnjoj ravni filma tako da se mogu pojaviti čak tri lokalizovana stanja.

Na slici 3.24 dati su grafici prostorne distribucije verovatnoća odgovarajućih energija po ravnima filma, a u donjem redu prikazani su zbirni grafici za sve distribucije energija. Sa ovih grafika vide se najveće verovatnoće nalaženja eksitona u unutrašnjem sloju filma i na graničnoj površi tog filma.



Slika 3.24: Verovatnoće nalaženja eksitona u perturbovanom petoslojnom filmu

U tabeli 3.7 i na slici 3.25 prikazane su prostorne verovatnoće nalaženja eksitona u petoslojnom molekulskom filmu i to za slučaj kada parametri uzimaju sledeće vrednosti: $d_0 = 0, 0$; $d_N = -0, 1$; $x_0 \in [-0, 5; 1, 0]$; $x_N = -0, 5$.

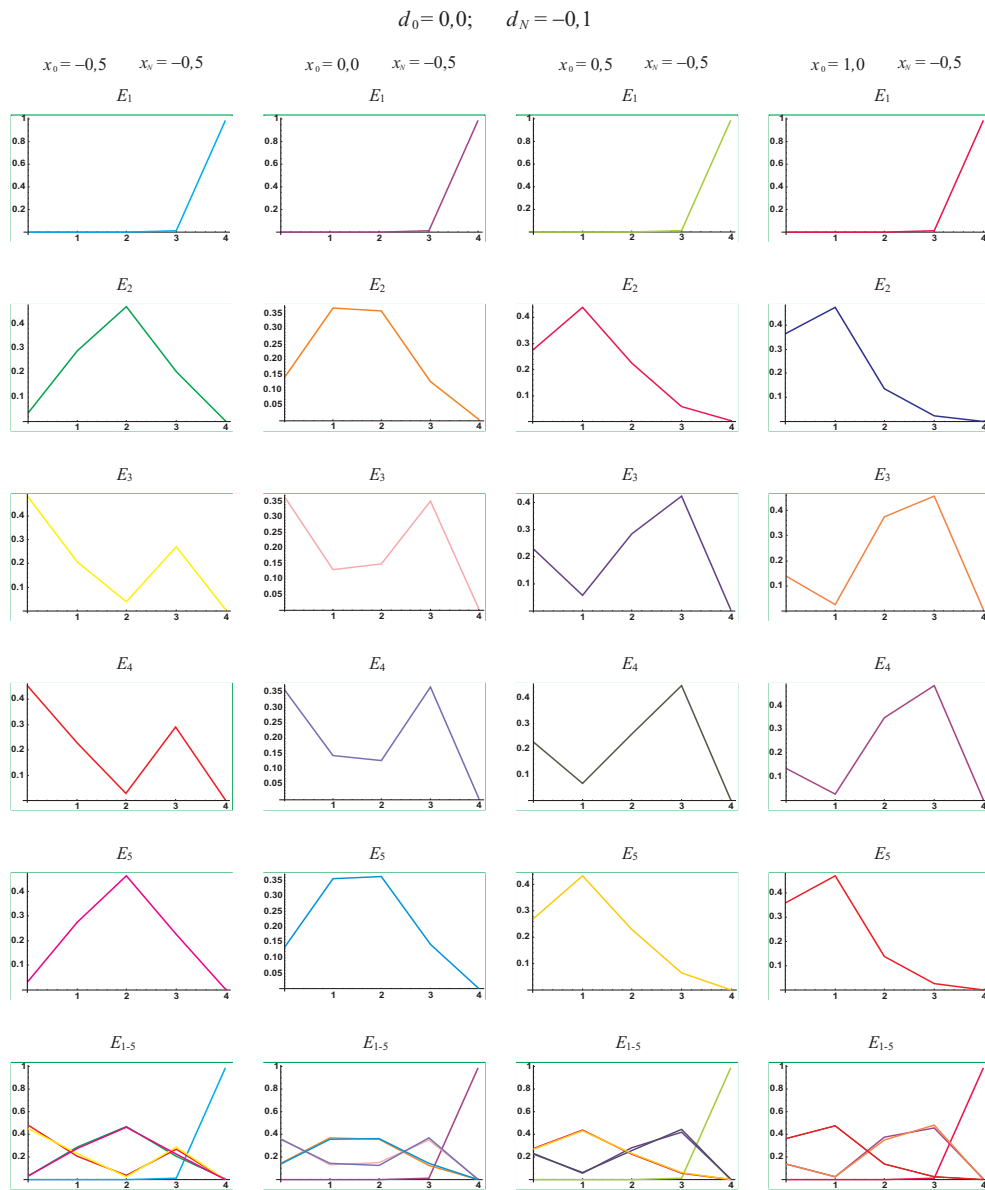
Redukovana relativna ENERGIJA	$d_0 = 0, 0$; $d_N = -0, 1$; $x_0 = -0, 5$; $x_N = -0, 5$				
	0. ravan	1. ravan	2. ravan	3. ravan	4. ravan
-5,05159	0,00000	0,00002	0,00045	0,01053	0,98900
-1,44551	0,03460	0,28920	0,46834	0,20382	0,00403
-0,32761	0,48130	0,20663	0,03919	0,26979	0,00309
0,35569	0,45221	0,22884	0,02758	0,28885	0,00252
1,46903	0,03189	0,27531	0,46444	0,22700	0,00136
Redukovana relativna ENERGIJA	$d_0 = 0, 0$; $d_N = -0, 1$; $x_0 = 0, 0$; $x_N = -0, 5$				
	0. ravan	1. ravan	2. ravan	3. ravan	4. ravan
-5,05160	0,00000	0,00002	0,00045	0,01053	0,98900
-1,60826	0,14260	0,36884	0,35893	0,12687	0,00276
-0,59774	0,36404	0,13007	0,15037	0,35099	0,00453
0,63423	0,35784	0,14395	0,12786	0,36746	0,00289
1,62336	0,13551	0,35712	0,36240	0,14414	0,00082
Redukovana relativna ENERGIJA	$d_0 = 0, 0$; $d_N = -0, 1$; $x_0 = 0, 5$; $x_N = -0, 5$				
	0. ravan	1. ravan	2. ravan	3. ravan	4. ravan
-5,05160	0,00000	0,00002	0,00045	0,01053	0,98899
-1,90044	0,27437	0,44042	0,22610	0,05761	0,00150
-0,76188	0,22931	0,05916	0,28408	0,42159	0,00587
0,80628	0,22758	0,06575	0,25891	0,44447	0,00330
1,90764	0,26874	0,43465	0,23047	0,06580	0,00034
Redukovana relativna ENERGIJA	$d_0 = 0, 0$; $d_N = -0, 1$; $x_0 = 1, 0$; $x_N = -0, 5$				
	0. ravan	1. ravan	2. ravan	3. ravan	4. ravan
-5,05161	0,00000	0,00003	0,00045	0,01054	0,98898
-2,28592	0,36358	0,47497	0,13650	0,02414	0,00082
-0,84597	0,13875	0,02482	0,37416	0,45567	0,00660
0,89434	0,13674	0,02734	0,35009	0,48236	0,00347
2,28917	0,36093	0,47284	0,13880	0,02730	0,00013

Tabela 3.7: Verovatnoće nalaženja eksitona u perturbovanom petoslojnom filmu

Energije čije vrednosti se nalaze izvan balkovske zone (tj. lokalizovana eksitonska stanja), kao i najveće vrednosti verovatnoća (po slojevima filma) za te energije, su prikazani podebljanim brojevima. Pri nepromenljivim vrednostima parametara $d_{0/N}$ ($d_0 = 0, 0$ i $d_N = -0, 1$ u tabelama 3.7) vidi se da prostorna lokalizacija, tj. verovatnoća nalaženja eksitona zavisi samo od promene transportnih graničnih parametara. Uvek je prisutno jedno lokalizovano stanje i to na donjoj graničnoj ravni, zbog perturbovanog (i umanjenog) parametra d_N za 10 %.

Povećanjem parametara x_0 do 100 % (donje tabele 3.7) vidi se da se prostorna lokalizacija, tj. verovatnoća nalaženja eksitona, srazmerno povećava upravo na prvoj unutrašnjoj ravni filma tako da se mogu pojaviti čak tri lokalizovana stanja.

Na slici 3.25 dati su grafici prostorne distribucije verovatnoća odgovarajućih energija po ravnima filma, a u donjem redu prikazani su zbirni grafici za sve distribucije energija. Sa ovih grafika vide se najveće verovatnoće nalaženja eksitona u unutrašnjem sloju filma i na graničnoj površi tog filma.



Slika 3.25: Verovatnoće nalaženja eksitona u perturbovanom petoslojnom filmu

U tabeli 3.8 i na slici 3.26 prikazane su prostorne verovatnoće nalaženja eksitona u petoslojnom molekulskom filmu i to za slučaj kada parametri uzimaju sledeće vrednosti: $d_0 = 0, 0$; $d_N = 0, 2$; $x_0 \in [-0, 5; 1, 0]$; $x_N = -0, 5$.

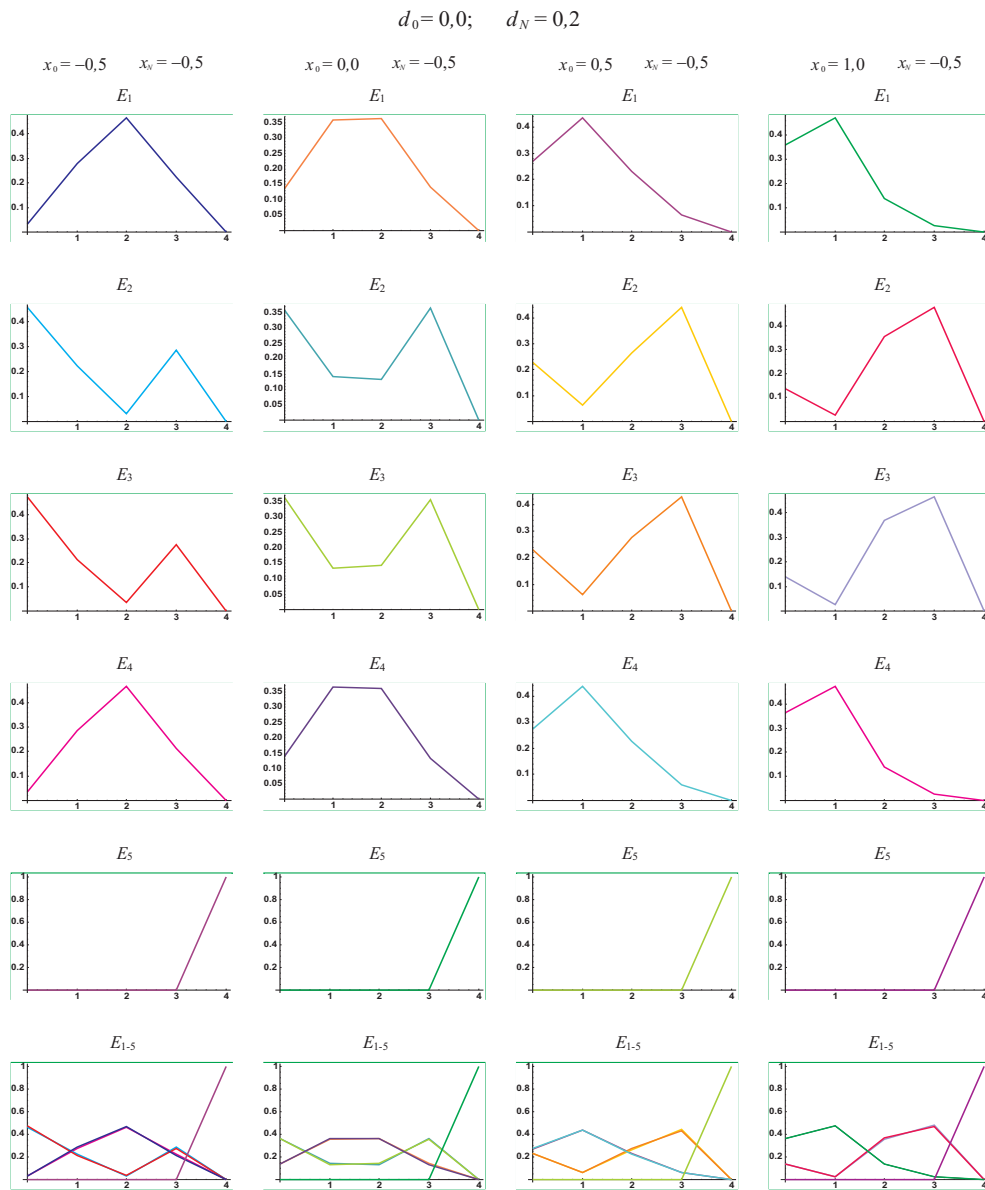
Redukovana relativna ENERGIJA	$d_0 = 0, 0$; $d_N = 0, 2$; $x_0 = -0, 5$; $x_N = -0, 5$				
	0. ravan	1. ravan	2. ravan	3. ravan	4. ravan
-1,46523	0,03236	0,27790	0,46576	0,22355	0,00043
-0,34921	0,45965	0,22422	0,03015	0,28532	0,00067
0,33516	0,47432	0,21313	0,03596	0,27585	0,00074
1,45409	0,03367	0,28475	0,46811	0,21275	0,00073
10,02520	0,00000	0,00000	0,00003	0,00253	0,99744
Redukovana relativna ENERGIJA	$d_0 = 0, 0$; $d_N = 0, 2$; $x_0 = 0, 0$; $x_N = -0, 5$				
	0. ravan	1. ravan	2. ravan	3. ravan	4. ravan
-1,62104	0,13671	0,35923	0,36222	0,14158	0,00026
-0,62658	0,35995	0,14132	0,13279	0,36513	0,00081
0,60845	0,36324	0,13448	0,14407	0,35720	0,00101
1,61398	0,14011	0,36497	0,36089	0,13356	0,00047
10,02520	0,00000	0,00000	0,00003	0,00253	0,99744
Redukovana relativna ENERGIJA	$d_0 = 0, 0$; $d_N = 0, 2$; $x_0 = 0, 5$; $x_N = -0, 5$				
	0. ravan	1. ravan	2. ravan	3. ravan	4. ravan
-1,90665	0,26962	0,43562	0,22997	0,06468	0,00011
-0,79744	0,22852	0,06459	0,26460	0,44135	0,00095
0,77551	0,22958	0,06137	0,27731	0,43048	0,00126
1,90339	0,27228	0,43842	0,22810	0,06097	0,00023
10,02520	0,00000	0,00000	0,00003	0,00253	0,99744
Redukovana relativna ENERGIJA	$d_0 = 0, 0$; $d_N = 0, 2$; $x_0 = 1, 0$; $x_N = -0, 5$				
	0. ravan	1. ravan	2. ravan	3. ravan	4. ravan
-2,28879	0,36130	0,47317	0,13856	0,02693	0,00004
-0,88497	0,13752	0,02693	0,35576	0,47878	0,00101
0,86116	0,13866	0,02571	0,36805	0,46619	0,00140
2,28740	0,36252	0,47419	0,13761	0,02557	0,00011
10,02520	0,00000	0,00000	0,00003	0,00253	0,99744

Tabela 3.8: Verovatnoće nalaženja eksitona u perturbovanom petoslojnom filmu

Energije čije vrednosti se nalaze izvan balkovske zone (tj. lokalizovana eksitonska stanja), kao i najveće vrednosti verovatnoća (po slojevima filma) za te energije, su prikazani podebljanim brojevima. Pri nepromenljivim vrednostima parametara $d_{0/N}$ ($d_0 = 0, 0$ i $d_N = 0, 2$ u tabelama 3.8) vidi se da prostorna lokalizacija, tj. verovatnoća nalaženja eksitona zavisi samo od promene transportnih graničnih parametara. Uvek je prisutno jedno lokalizovano stanje i to na donjoj graničnoj ravni, zbog perturbovanog (i uvećanog) parametra d_N za 20 %.

Povećanjem parametara x_0 do 100 % (donje tabele 3.8) vidi se da se prostorna lokalizacija, tj. verovatnoća nalaženja eksitona, srazmerno povećava upravo na prvoj unutrašnjoj ravni filma tako da se mogu pojaviti čak tri lokalizovana stanja.

Na slici 3.26 dati su grafici prostorne distribucije verovatnoća odgovarajućih energija po ravnima filma, a u donjem redu prikazani su zbirni grafici za sve distribucije energija. Sa ovih grafika vide se najveće verovatnoće nalaženja eksitona u unutrašnjem sloju filma i na donjoj graničnoj površi tog filma.



Slika 3.26: Verovatnoće nalaženja eksitona u perturbovanom petoslojnom filmu

U tabeli 3.9 i na slici 3.28 prikazane su prostorne verovatnoće nalaženja eksitona u petoslojnom molekulskom filmu i to za slučaj kada parametri uzimaju sledeće vrednosti: $d_0 = 0, 0$; $d_N = -0, 2$; $x_0 \in [-0, 5; 1, 0]$; $x_N = -0, 5$.

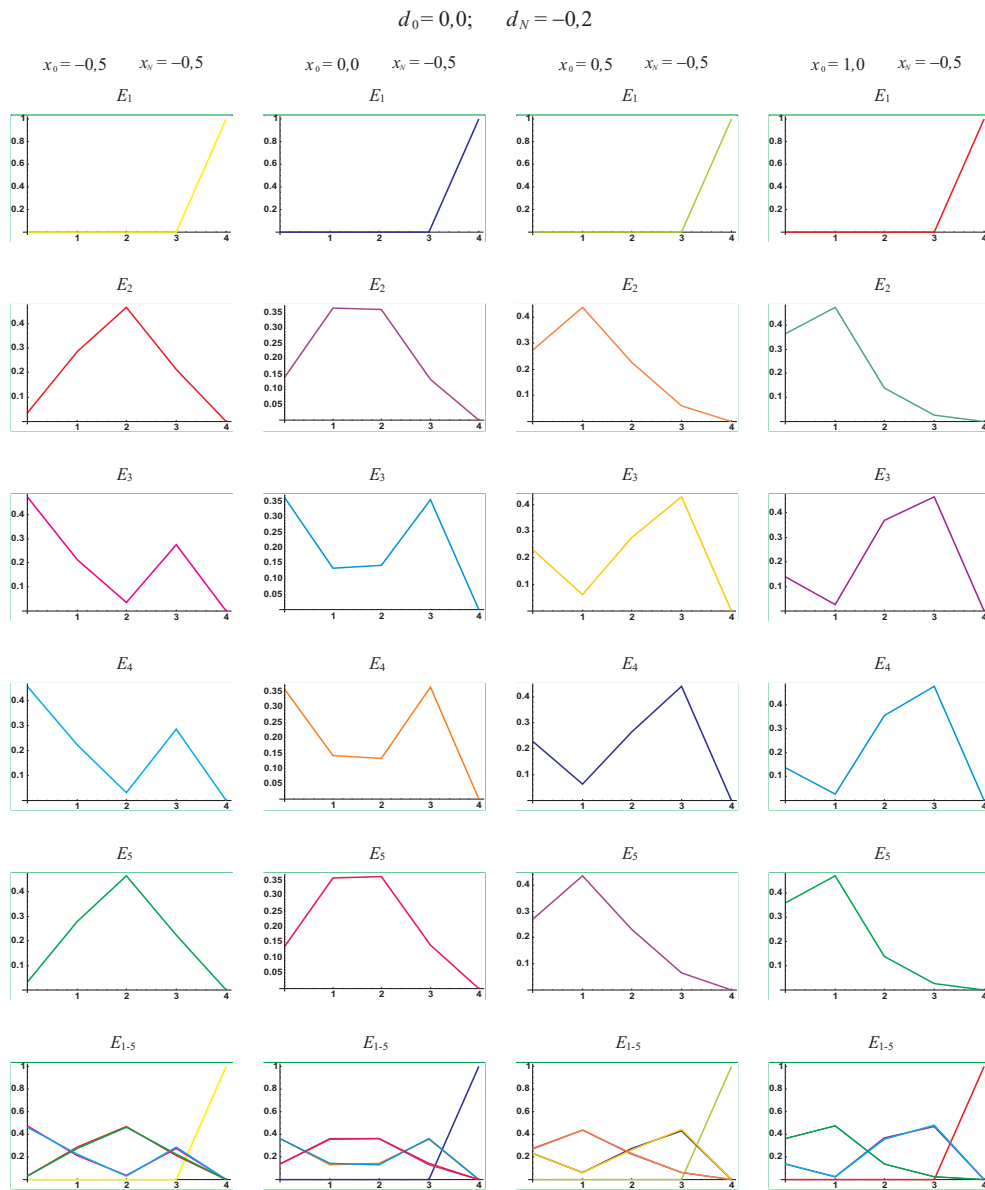
Redukovana relativna ENERGIJA	$d_0 = 0, 0$; $d_N = -0, 2$; $x_0 = -0, 5$; $x_N = -0, 5$				
	0. ravan	1. ravan	2. ravan	3. ravan	4. ravan
-10,02520	0,00000	0,00000	0,00003	0,00253	0,99744
-1,45409	0,03367	0,28475	0,46811	0,21275	0,00073
-0,33516	0,47432	0,21313	0,03596	0,27585	0,00074
0,34921	0,45965	0,22422	0,03015	0,28532	0,00067
1,46523	0,03236	0,27790	0,46576	0,22355	0,00043
Redukovana relativna ENERGIJA	$d_0 = 0, 0$; $d_N = -0, 2$; $x_0 = 0, 0$; $x_N = -0, 5$				
	0. ravan	1. ravan	2. ravan	3. ravan	4. ravan
-10,02520	0,00000	0,00000	0,00003	0,00253	0,99744
-1,61398	0,14011	0,36497	0,36089	0,13356	0,00047
-0,60845	0,36324	0,13448	0,14407	0,35720	0,00101
0,62658	0,35995	0,14132	0,13279	0,36513	0,00081
1,62104	0,13671	0,35923	0,36222	0,14158	0,00026
Redukovana relativna ENERGIJA	$d_0 = 0, 0$; $d_N = -0, 2$; $x_0 = 0, 5$; $x_N = -0, 5$				
	0. ravan	1. ravan	2. ravan	3. ravan	4. ravan
-10,02520	0,00000	0,00000	0,00003	0,00253	0,99744
-1,90339	0,27228	0,43842	0,22810	0,06097	0,00023
-0,77551	0,22958	0,06137	0,27731	0,43048	0,00126
0,79744	0,22852	0,06459	0,26460	0,44135	0,00095
1,90665	0,26962	0,43562	0,22997	0,06468	0,00011
Redukovana relativna ENERGIJA	$d_0 = 0, 0$; $d_N = -0, 2$; $x_0 = 1, 0$; $x_N = -0, 5$				
	0. ravan	1. ravan	2. ravan	3. ravan	4. ravan
-10,02520	0,00000	0,00000	0,00003	0,00253	0,99744
-2,28740	0,36252	0,47419	0,13761	0,02557	0,00011
-0,86116	0,13866	0,02571	0,36805	0,46619	0,00140
0,88479	0,13752	0,02693	0,35576	0,47878	0,00101
2,28879	0,36130	0,47317	0,13856	0,02693	0,00004

Tabela 3.9: Verovatnoće nalaženja eksitona u perturbovanom petoslojnom filmu

Energije čije vrednosti se nalaze izvan balkovske zone (tj. lokalizovana eksitonska stanja), kao i najveće vrednosti verovatnoća (po slojevima filma) za te energije, su prikazani podebljanim brojevima. Pri nepromenljivim vrednostima parametara $d_{0/N}$ ($d_0 = 0, 0$ i $d_N = -0, 2$ u tabelama 3.9) vidi se da je prostorna lokalizacija, tj. verovatnoća nalaženja eksitona skoro nezavisna od promene transportnih graničnih parametara. Uvek je prisutno jedno lokalizovano stanje i to na donjoj graničnoj ravni, zbog perturbovanog (i umanjeno) parametra d_N za 20 %.

Povećanjem parametara x_0 do 100 % (donje tabele 3.9) vidi se da se prostorna lokalizacija, tj. verovatnoća nalaženja eksitona, srazmerno slabo povećava upravo na prvoj unutrašnjoj ravni filma tako da se mogu pojaviti najviše dva lokalizovana stanja.

Na slici 3.27 dati su grafici prostorne distribucije verovatnoća odgovarajućih energija po ravnima filma, a u donjem redu prikazani su zbirni grafici za sve distribucije energija. Sa ovih grafika vide se najveće verovatnoće nalaženja eksitona u unutrašnjem sloju filma i na donjoj graničnoj površi tog filma.



Slika 3.27: Verovatnoće nalaženja eksitona u perturbovanom petoslojnom filmu

U tabeli 3.10 i na slici 3.29 prikazane su prostorne verovatnoće nalaženja eksitona u petoslojnom molekulskom filmu i to za slučaj kada parametri uzimaju sledeće vrednosti: $d_0 = 0, 1$; $d_N = \pm 0, 1; \pm 0, 2$; $x_0 = -0, 5; 0, 5$; $x_N = -0, 5$.

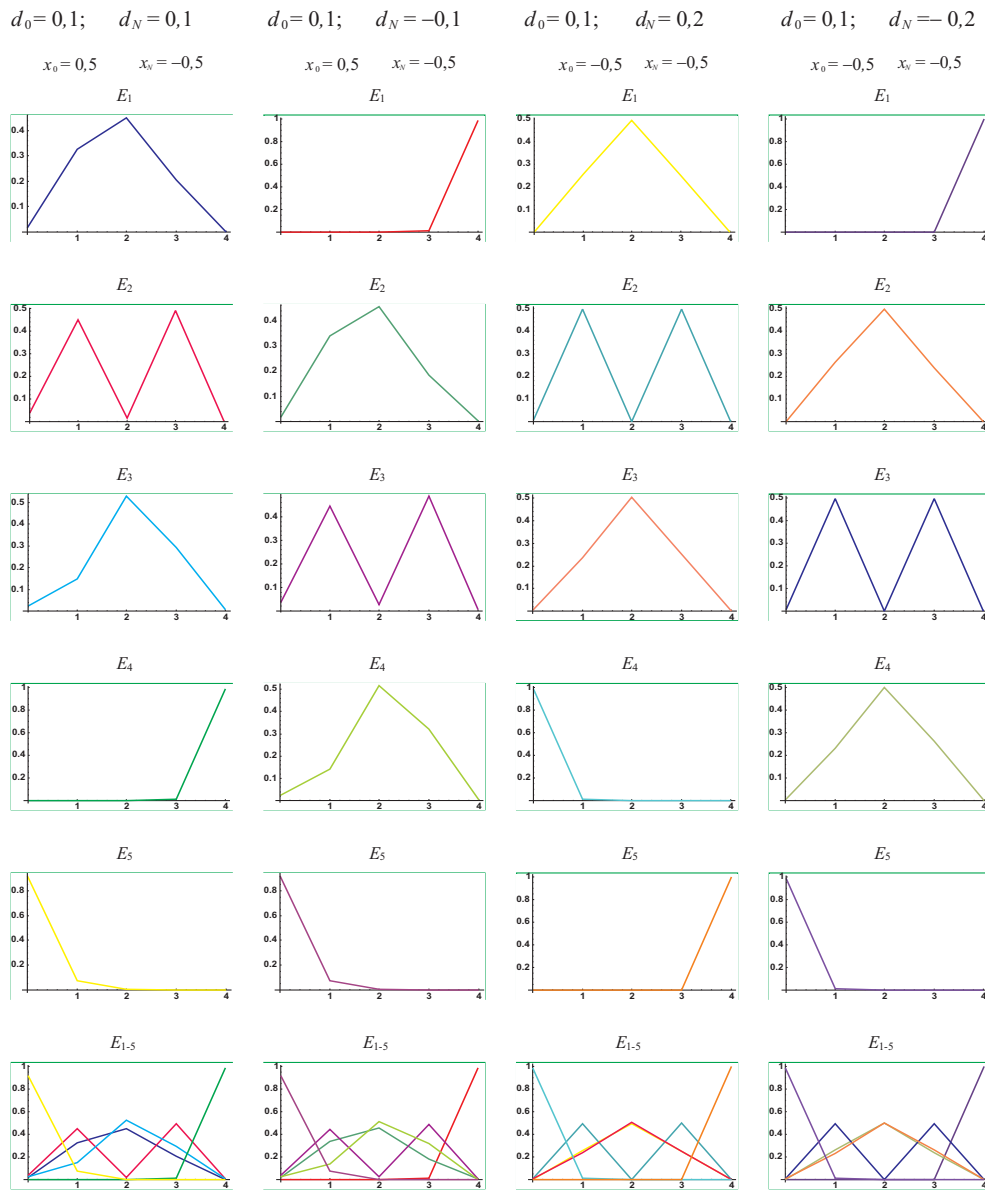
Redukovana relativna ENERGIJA	$d_0 = 0, 1; d_N = 0, 1; x_0 = 0, 5; x_N = -0, 5$				
	0. ravan	1. ravan	2. ravan	3. ravan	4. ravan
-1,52273	0,01721	0,32538	0,45136	0,20484	0,00120
-0,23452	0,03692	0,44965	0,01715	0,49179	0,00449
1,27621	0,02424	0,14941	0,52831	0,29276	0,00528
5,05150	0,00023	0,00000	0,00041	0,01049	0,98887
5,42955	0,92139	0,07556	0,00277	0,00012	0,00016
Redukovana relativna ENERGIJA	$d_0 = 0, 1; d_N = -0, 1; x_0 = 0, 5; x_N = -0, 5$				
	0. ravan	1. ravan	2. ravan	3. ravan	4. ravan
-5,05160	0,00000	0,00002	0,00045	0,01053	0,98900
-1,50138	0,01812	0,34031	0,45421	0,18361	0,00375
-0,18551	0,03717	0,44416	0,02740	0,48603	0,00524
1,30600	0,02312	0,13996	0,51519	0,31973	0,00201
5,42949	0,92160	0,07555	0,00275	0,00009	0,00000
Redukovana relativna ENERGIJA	$d_0 = 0, 1; d_N = 0, 2; x_0 = -0, 5; x_N = -0, 5$				
	0. ravan	1. ravan	2. ravan	3. ravan	4. ravan
-1,42951	0,00154	0,25525	0,49361	0,24912	0,00048
-0,03726	0,00489	0,49667	0,00008	0,49713	0,00123
1,38999	0,00456	0,23755	0,50584	0,25121	0,00085
5,05159	0,98901	0,01053	0,00045	0,00002	0,00000
10,02520	0,00000	0,00000	0,00003	0,00253	0,99744
Redukovana relativna ENERGIJA	$d_0 = 0, 1; d_N = -0, 2; x_0 = -0, 5; x_N = -0, 5$				
	0. ravan	1. ravan	2. ravan	3. ravan	4. ravan
-10,02520	0,00000	0,00000	0,00003	0,00253	0,99744
-1,41708	0,00159	0,26202	0,49764	0,23793	0,00081
-0,01241	0,00494	0,49633	0,00007	0,49679	0,00125
1,40309	0,00447	0,23112	0,50119	0,26273	0,00051
5,05159	0,98900	0,01053	0,00045	0,00002	0,00000

Tabela 3.10: Verovatnoće nalaženja eksitona u perturbovanom petoslojnom filmu

Energije čije vrednosti se nalaze izvan balkovske zone (tj. lokalizovana eksitonska stanja), kao i najveće vrednosti verovatnoća (po slojevima filma) za te energije, su prikazani podebljanim brojevima. Pri promenljivim vrednostima parametara d_N ($d_0 = 0, 1$ i $d_N = \pm 0, 1; \pm 0, 2$ u tabelama 3.10) vidi se da je prostorna lokalizacija, tj. verovatnoća nalaženja eksitona skoro nezavisna od promene transportnih graničnih parametara. Uvek su prisutna dva lokalizovana stanja i to na donjoj i gornjoj graničnoj ravni, zbog perturbovanog (i umanjenog ili uvećanog) parametra d_N za 10 ili 20 %.

Povećanjem parametara d_N od -10 do $+10$ % (gornje tabele 3.10) ili od -20 do $+20$ % (donje tabele 3.10) vidi se da se prostorna lokalizacija, tj. verovatnoća nalaženja eksitona, praktično ne menja, već se menja vrednost energije za skoro isti iznos iznad i ispod balkovske vrednosti. Po jedno lokalizovano stanje javljaju se na svakoj graničnoj ravni filma.

Na slici 3.28 dati su grafici prostorne distribucije verovatnoća odgovarajućih energija po ravnima filma, a u donjem redu prikazani su zbirni grafici za sve distribucije energija. Sa ovih grafika vide se najveće verovatnoće nalaženja eksitona na obe granične površi filma.



Slika 3.28: Verovatnoće nalaženja eksitona u perturbovanom petoslojnom filmu

U tabelama 3.11 i na slici 3.30 prikazane su prostorne verovatnoće nalaženja eksitona u petoslojnom molekulskom filmu i to za slučaj kada parametri uzimaju sledeće vrednosti: $d_0 = -0,1; 0,2$; $d_N = \pm 0,2$; $x_0 = -0,5$; $x_N = -0,5$.

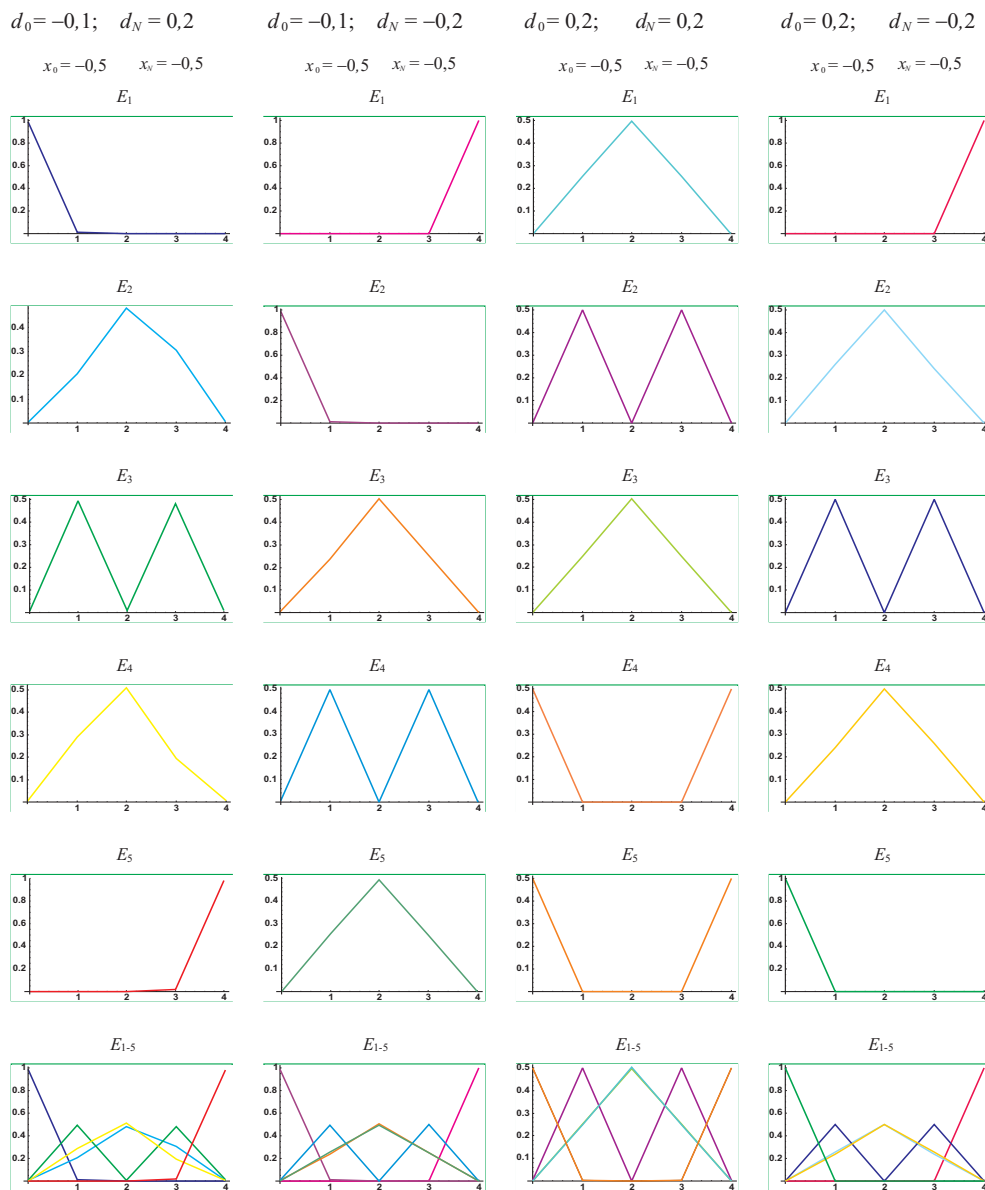
Redukovana relativna ENERGIJA	$d_0 = -0,1; d_N = 0,2; x_0 = -0,5; x_N = -0,5$				
	0. ravan	1. ravan	2. ravan	3. ravan	4. ravan
-5,05160	0,98900	0,01053	0,00045	0,00002	0,00000
-1,45263	0,00411	0,20682	0,47979	0,30406	0,00522
-0,08531	0,00511	0,49324	0,00915	0,48185	0,01066
1,36728	0,00178	0,28940	0,51040	0,19260	0,00581
10,22230	0,00000	0,00000	0,00021	0,02148	0,97831
Redukovana relativna ENERGIJA	$d_0 = -0,1; d_N = -0,2; x_0 = -0,5; x_N = -0,5$				
	0. ravan	1. ravan	2. ravan	3. ravan	4. ravan
-10,02520	0,00000	0,00000	0,00003	0,00253	0,99744
-5,05159	0,98901	0,01053	0,00045	0,00002	0,00000
-1,38999	0,00456	0,23755	0,50584	0,25121	0,00085
0,03726	0,00489	0,49667	0,00008	0,49713	0,00123
1,42951	0,00154	0,25525	0,49361	0,24912	0,00048
Redukovana relativna ENERGIJA	$d_0 = 0,2; d_N = 0,2; x_0 = -0,5; x_N = -0,5$				
	0. ravan	1. ravan	2. ravan	3. ravan	4. ravan
-1,42520	0,00048	0,25169	0,49565	0,25169	0,00048
-0,02493	0,00124	0,49876	0,00000	0,49876	0,00124
1,39975	0,00083	0,24702	0,50429	0,24702	0,00083
10,02490	0,49876	0,00124	0,00000	0,00124	0,49876
10,02540	0,49868	0,00129	0,00005	0,00129	0,49868
Redukovana relativna ENERGIJA	$d_0 = 0,2; d_N = -0,2; x_0 = -0,5; x_N = -0,5$				
	0. ravan	1. ravan	2. ravan	3. ravan	4. ravan
-10,02520	0,00000	0,00000	0,00003	0,00253	0,99744
-1,41264	0,00005	0,25842	0,49982	0,24045	0,00082
0,00000	0,00125	0,49860	0,00031	0,49860	0,00125
1,41264	0,00082	0,24045	0,49982	0,25842	0,00050
10,02520	0,99744	0,00253	0,00003	0,00000	0,00000

Tabela 3.11: Verovatnoće nalaženja eksitona u perturbovanom petoslojnom filmu

Energije čije vrednosti se nalaze izvan balkovske zone (tj. lokalizovana eksitonska stanja), kao i najveće vrednosti verovatnoća (po slojevima filma) za te energije, su prikazani podebljanim brojevima. Pri nepromenljivim vrednostima parametara $x_{0/N}$ ($x_0 = -0,5$ i $x_N = -0,5$ u tabelama 3.11) vidi se da je prostorna lokalizacija, tj. verovatnoća nalaženja eksitona skoro nezavisna od promene graničnih parametara d . Uvek su prisutna dva lokalizovana stanja i to na donjoj i gornjoj graničnoj ravni, zbog perturbovanog (i umanjenog ili uvećanog) parametra $d_{0/N}$ za 10 ili 20 %.

Povećanjem parametara d_0 od -10% (gornje tabele 3.11) do $+20\%$ (donje tabele 3.11) i promenom parametra d_N od -20 do $+20\%$ vidi se da se prostorna lokalizacija, tj. verovatnoća nalaženja eksitona, praktično ne menja, već se menja vrednost energije za skoro isti iznos iznad i ispod balkovske vrednosti. Na graničnim ravnima filma javljaju se po jedno lokalizovano stanje. Izuzetak čini najperturbovaniji slučaj, kada granični parametri uzimaju maksimalne vrednosti ($d_0 = d_N = 0, 2$) i kada je verovatnoća pojave lokalizovanih stanja podjednaka na obe granične ravni filma.

Na slici 3.29 dati su grafici prostorne distribucije verovatnoća odgovarajućih energija po ravnima filma, a u donjem redu prikazani su zbirni grafici za sve distribucije energija. Sa ovih grafika vide se najveće verovatnoće nalaženja eksitona na obe granične površi filma.



Slika 3.29: Verovatnoće nalaženja eksitona u perturbovanom petoslojnom filmu

3.5 Dielektrične i optičke osobine ultratankih filmova

Pri određivanju dinamičke permitivnosti kristalnog filma, takođe se može koristiti formula Džalošinskog i Pitajevskog [24–26,47–49,66–70] i u istom obliku (2.39) koja je korišćena kod proračuna permitivnosti odgovarajućih balk-struktura, ali sa tom razlikom što sada permitivnost zavisi od sloja filma n_z , tj.

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

Uvrštavanjem izraza za Grinove funkcije (3.16) dobija se:

$$\varepsilon_{n_z}^{-1} = 1 - \frac{\hbar S}{|X|} \sum_{\nu=1}^{N+1} \sum_{s=+,-} \frac{g_{n_z}^\nu}{\varrho_s - \varrho_\nu} , \quad (3.20)$$

gde su: $\varrho_\pm = \frac{\mp \hbar \omega - \Delta}{|X|} + 2(\cos a_x k_x + \cos a_y k_y)$, a obeležavanjem $\frac{\Delta}{|X|} \equiv |p|$ i sređivanjem ovog izraza sledi:

$$\varepsilon_{n_z}(\omega) = \left\{ 1 - \frac{2\hbar S}{|X|} \sum_{\nu=1}^{N+1} g_{n_z}^\nu \frac{\varrho_\nu - |p| - 2(\cos a_x k_x + \cos a_y k_y)}{\left(\frac{\hbar \omega}{|X|}\right)^2 - [\varrho_\nu - |p| - 2(\cos a_x k_x + \cos a_y k_y)]^2} \right\}^{-1} . \quad (3.21)$$

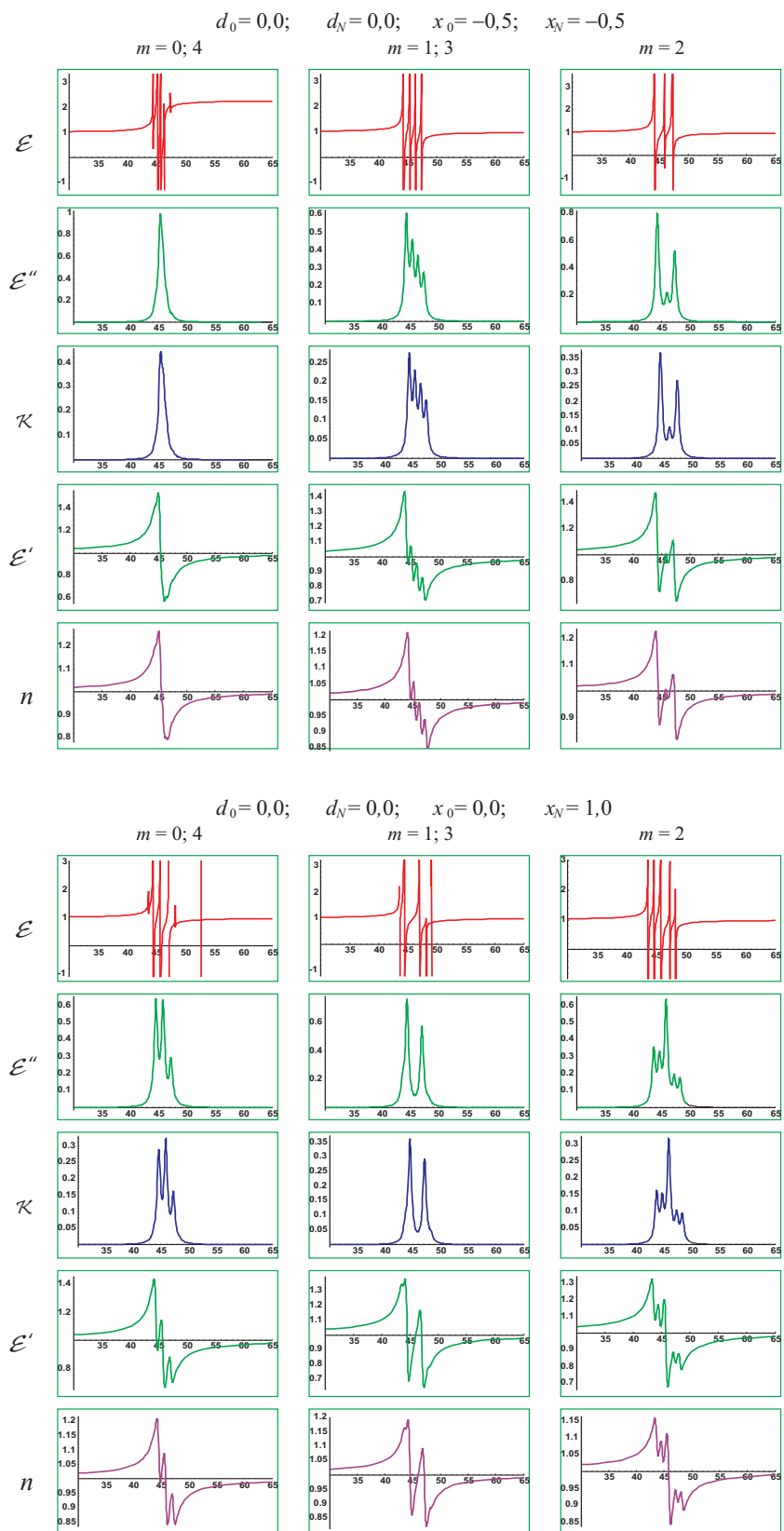
Na osnovu Kramers-Kronigove disperzione relacije (objašnjene u glavi 2, paragraf 2.4), definišu se indeksi apsorpcije i prelamanja:

$$\begin{aligned} \kappa_{n_z}(\omega) &= \sqrt{\frac{\varepsilon'_{n_z}(\omega)}{2} \left\{ \sqrt{1 + \left[\frac{\varepsilon''_{n_z}(\omega)}{\varepsilon'_{n_z}(\omega)} \right]^2} - 1 \right\}} ; \\ n_{n_z}(\omega) &= \sqrt{\frac{\varepsilon'_{n_z}(\omega)}{2} \left\{ \sqrt{1 + \left[\frac{\varepsilon''_{n_z}(\omega)}{\varepsilon'_{n_z}(\omega)} \right]^2} + 1 \right\}} , \end{aligned} \quad (3.22)$$

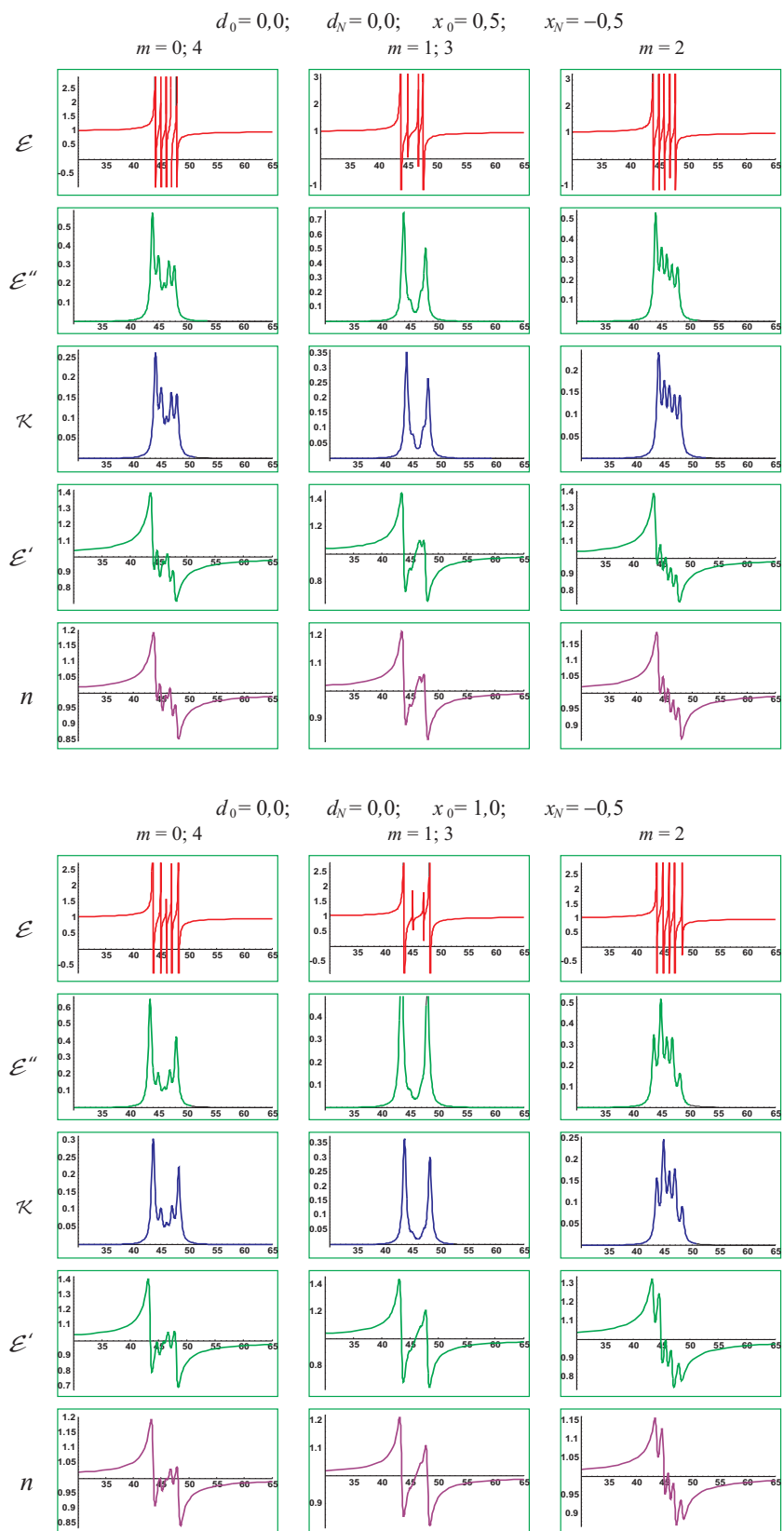
jer je $\varepsilon_{n_z}(\omega) = \varepsilon'_{n_z}(\omega) + i\varepsilon''_{n_z}(\omega)$.

Na slikama 3.30 do 3.43 su prikazane zavisnosti dinamičke permitivnosti (ε), imaginarnog dela dinamičke permitivnosti (ε''), indeksa apsorpcije (κ), realnog dela dinamičke permitivnosti (ε') i indeksa prelamanja (n) – sve jedno ispod drugog, respektivno, od redukovane relativne energije spoljašnjeg elektromagnetnog polja ($\tilde{\omega} \equiv \hbar\omega/|X|$), za petoslojni molekularni film. Zavisnost je računata za ravanski centar Brillouenove zone ($k_x = k_y = 0$), ali pojedinačno po slojevima (paralelnim graničnim površima) kristalnog filma, dakle, za $n_z = 0$, pa $n_z = 1, 2, 3, 4$. Na svakom grafiku je praćen uticaj graničnih parametara $d_{0,N}$ i $x_{0,N}$ i to kako na veličinu permitivnosti i oblik (izgled) njene zavisnosti od frekvencije spoljašnjeg polja, tako i na broj i položaj rezonantnih pikova.¹⁵

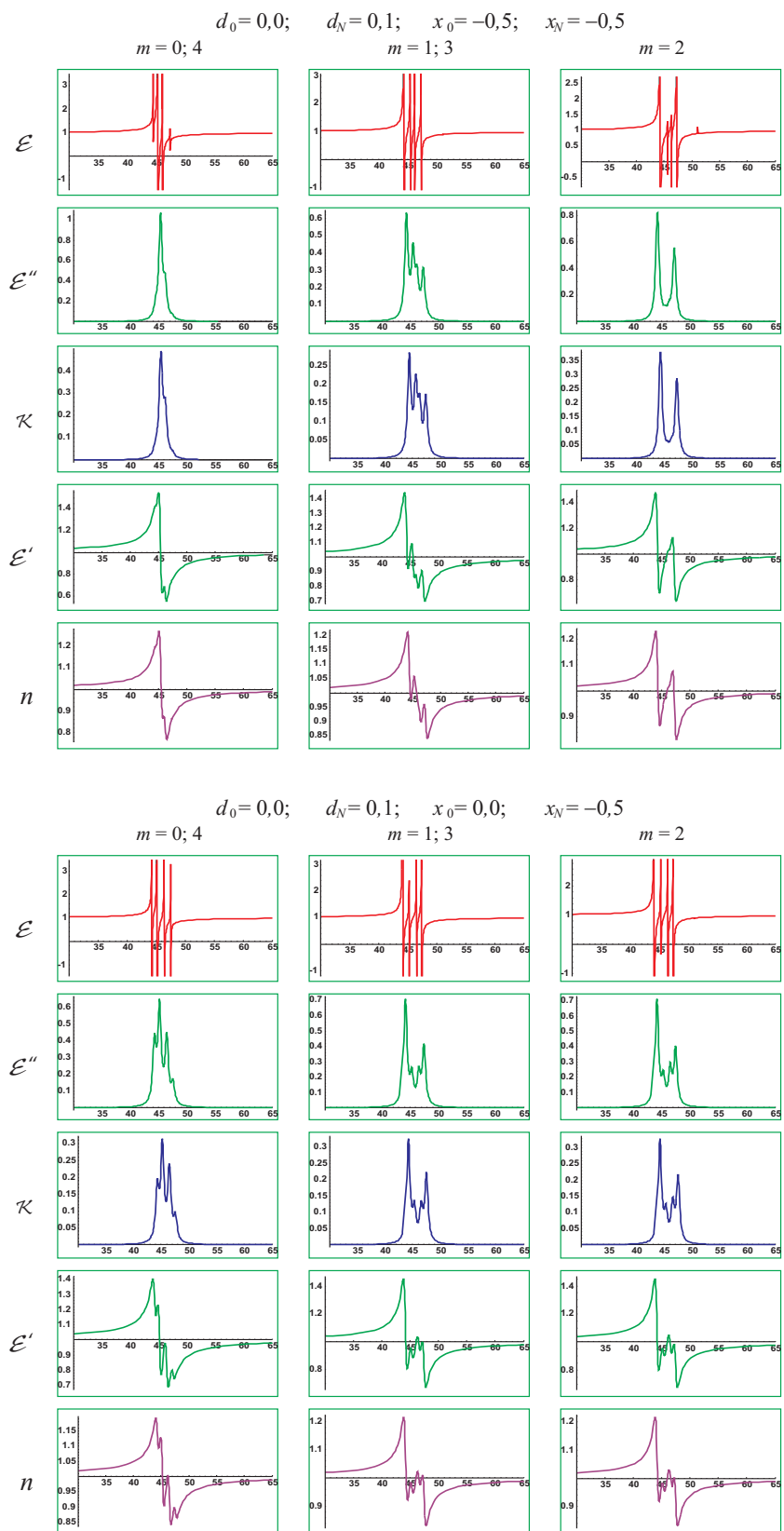
¹⁵ Rezonantni pikovi u frekventnoj zavisnosti dinamičke permitivnosti su položaji – rezonantne frekvencije, u kojima permitivnost divergira ($\varepsilon \rightarrow \pm\infty$). To su i energije (talasne dužine) onog elektromagnetnog zračenja koje modelni kristal na datom mestu „proguta”, tj. te energije se na tom mestu apsorbuju.



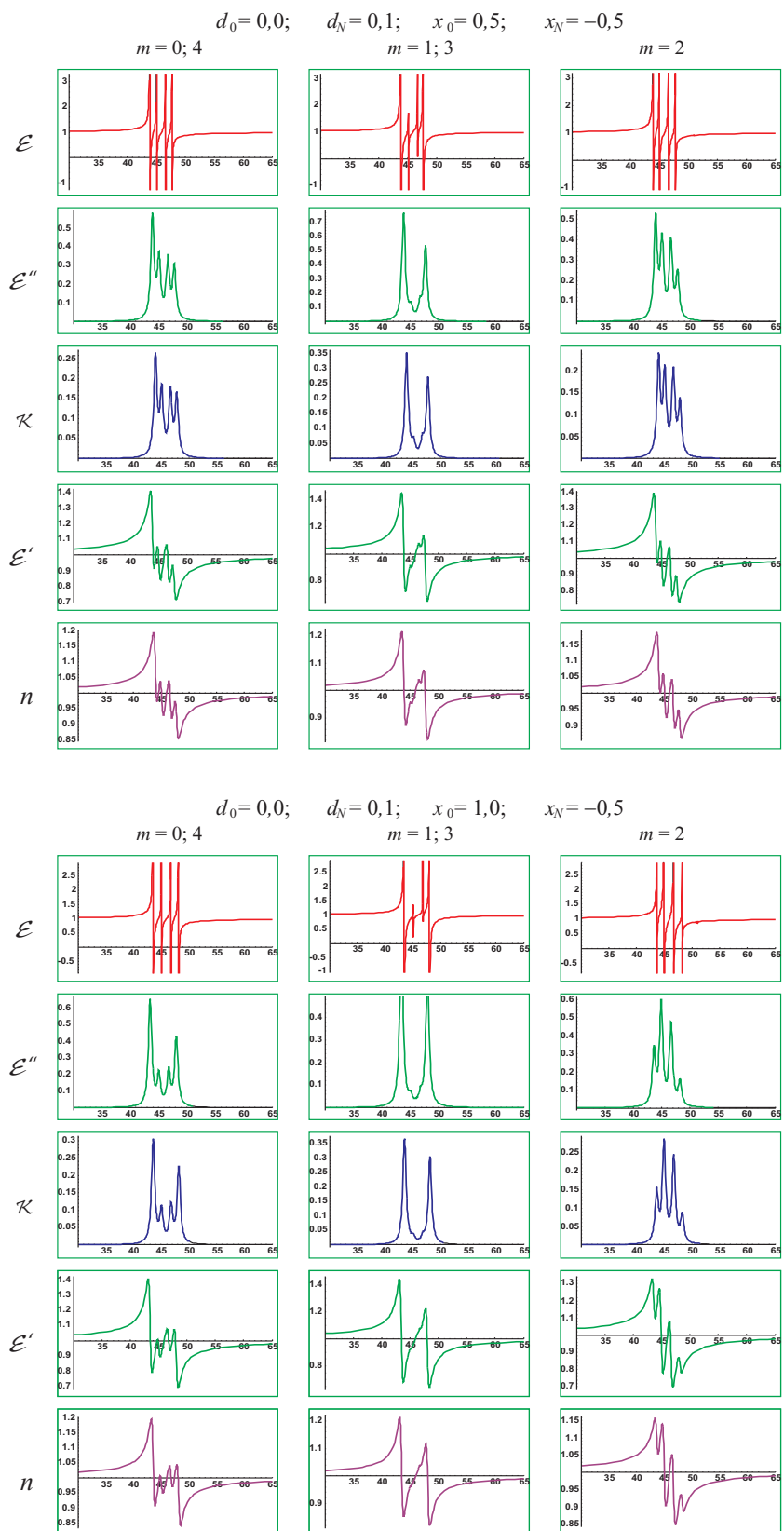
Slika 3.30: Permitivnost i indeksi prelamanja i apsorpcije molekuskog filma



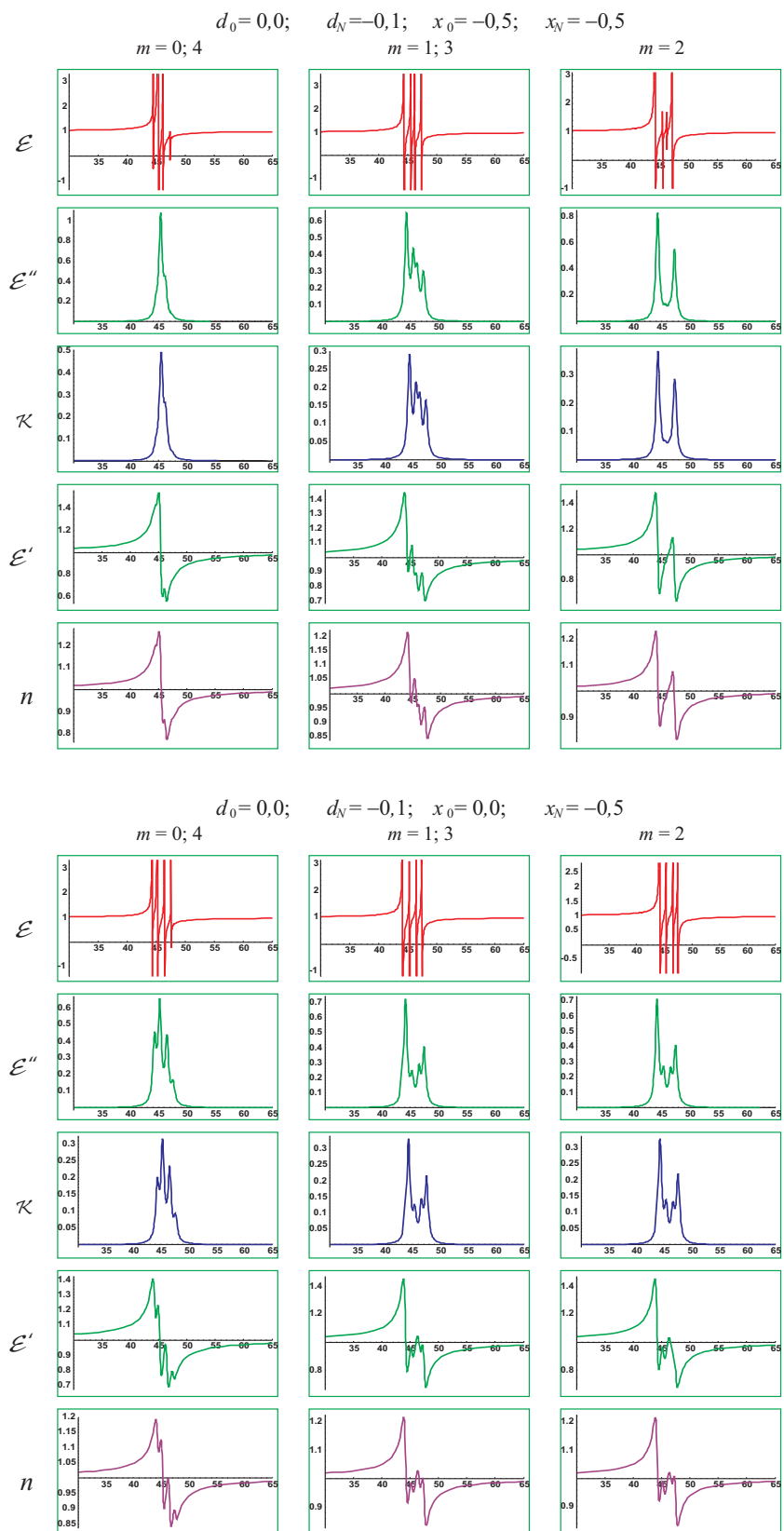
Slika 3.31: Permitivnost i indeksi prelamanja i apsorpcije molekuskog filma



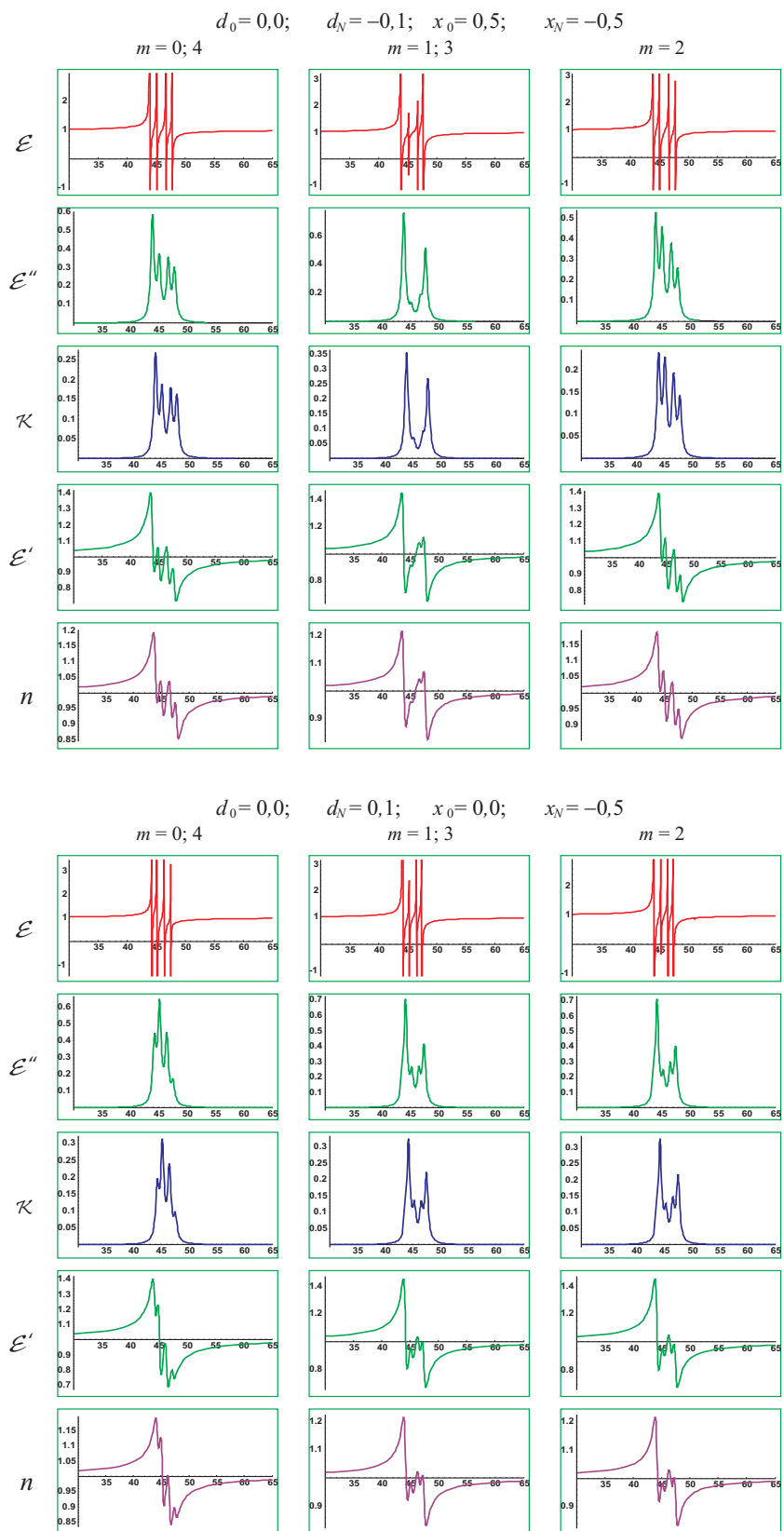
Slika 3.32: Permitivnost i indeksi prelamanja i apsorpcije molekuskog filma



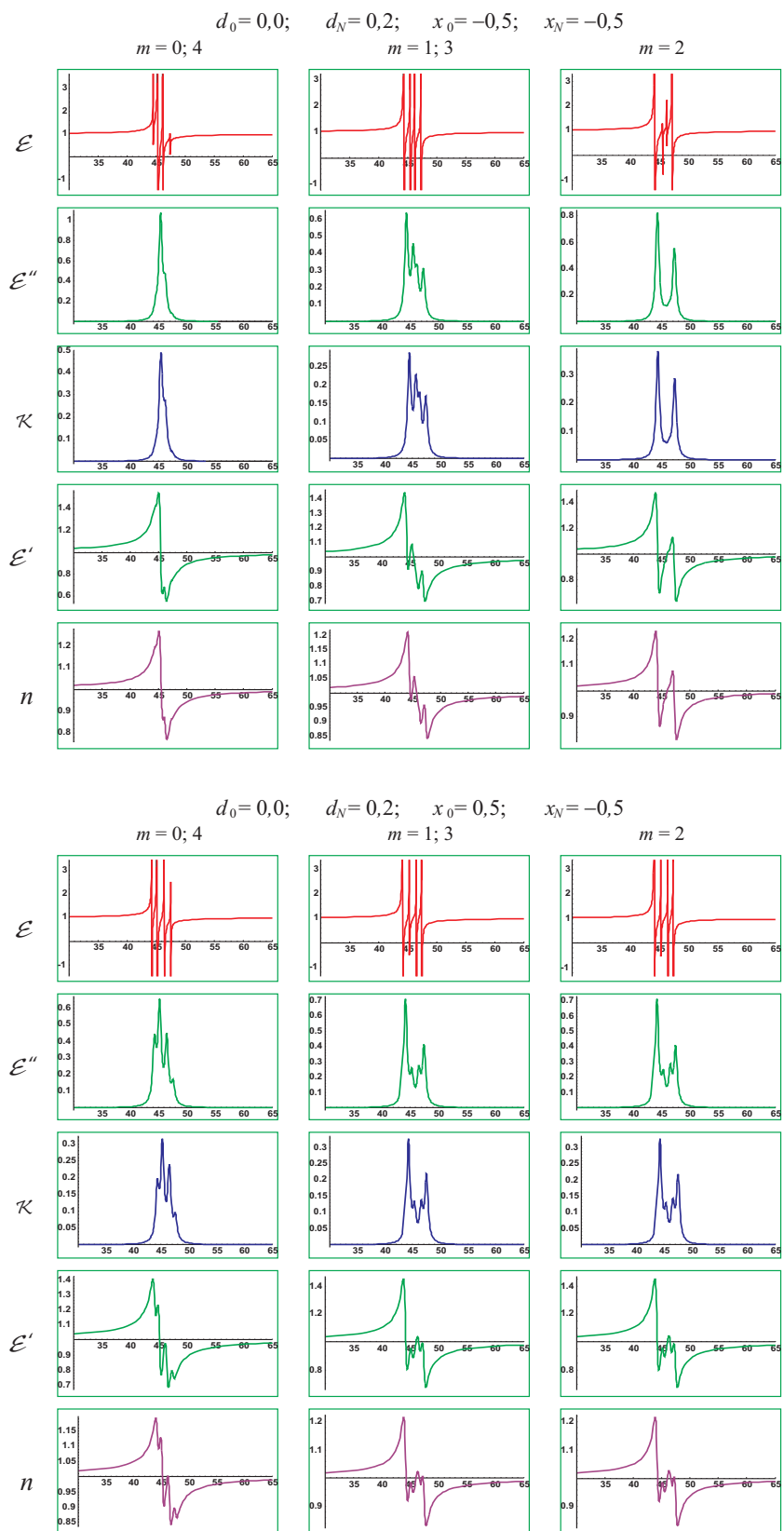
Slika 3.33: Permitivnost i indeksi prelamanja i apsorpcije molekuskog filma



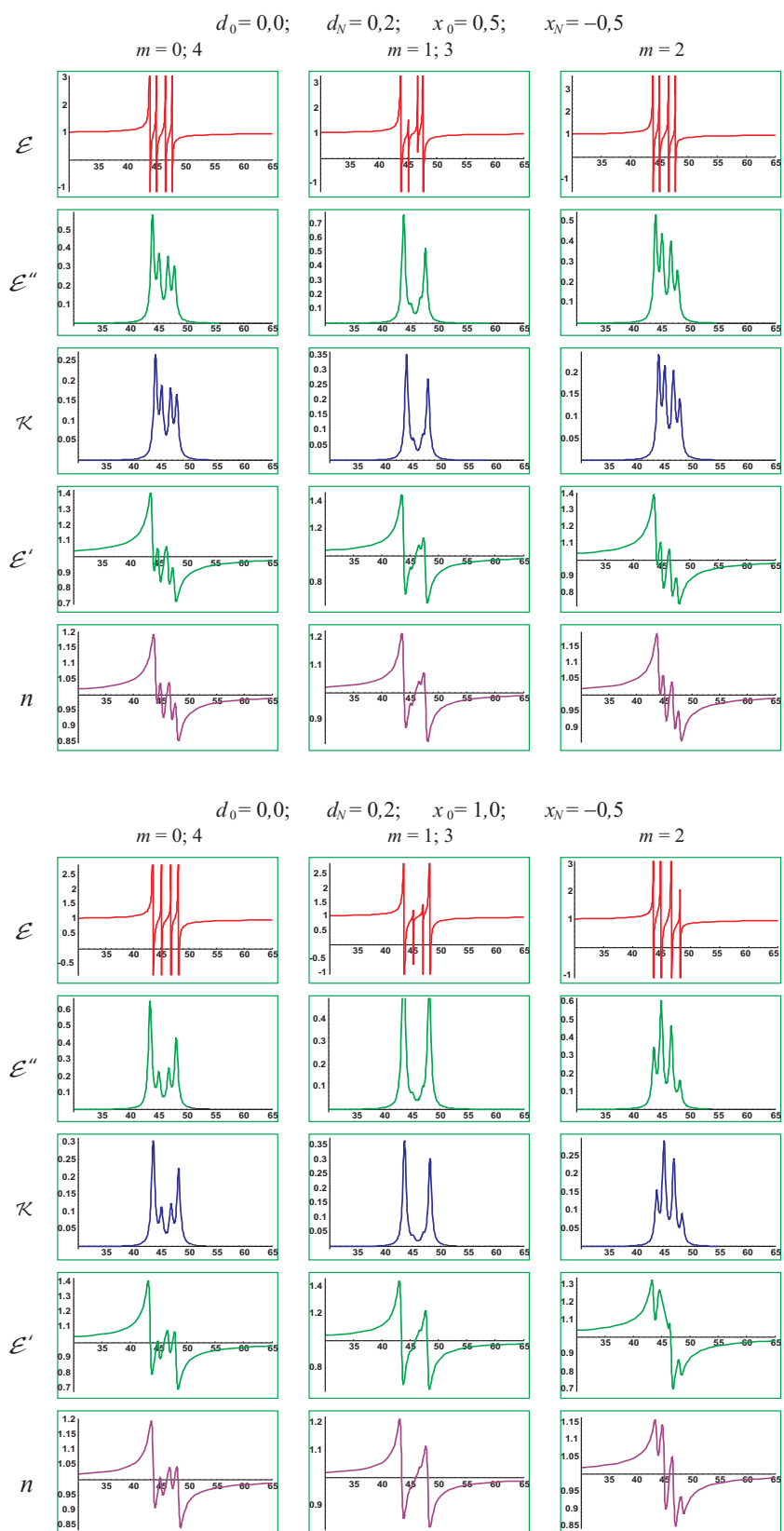
Slika 3.34: Permitivnost i indeksi prelamanja i absorpcije molekuskog filma



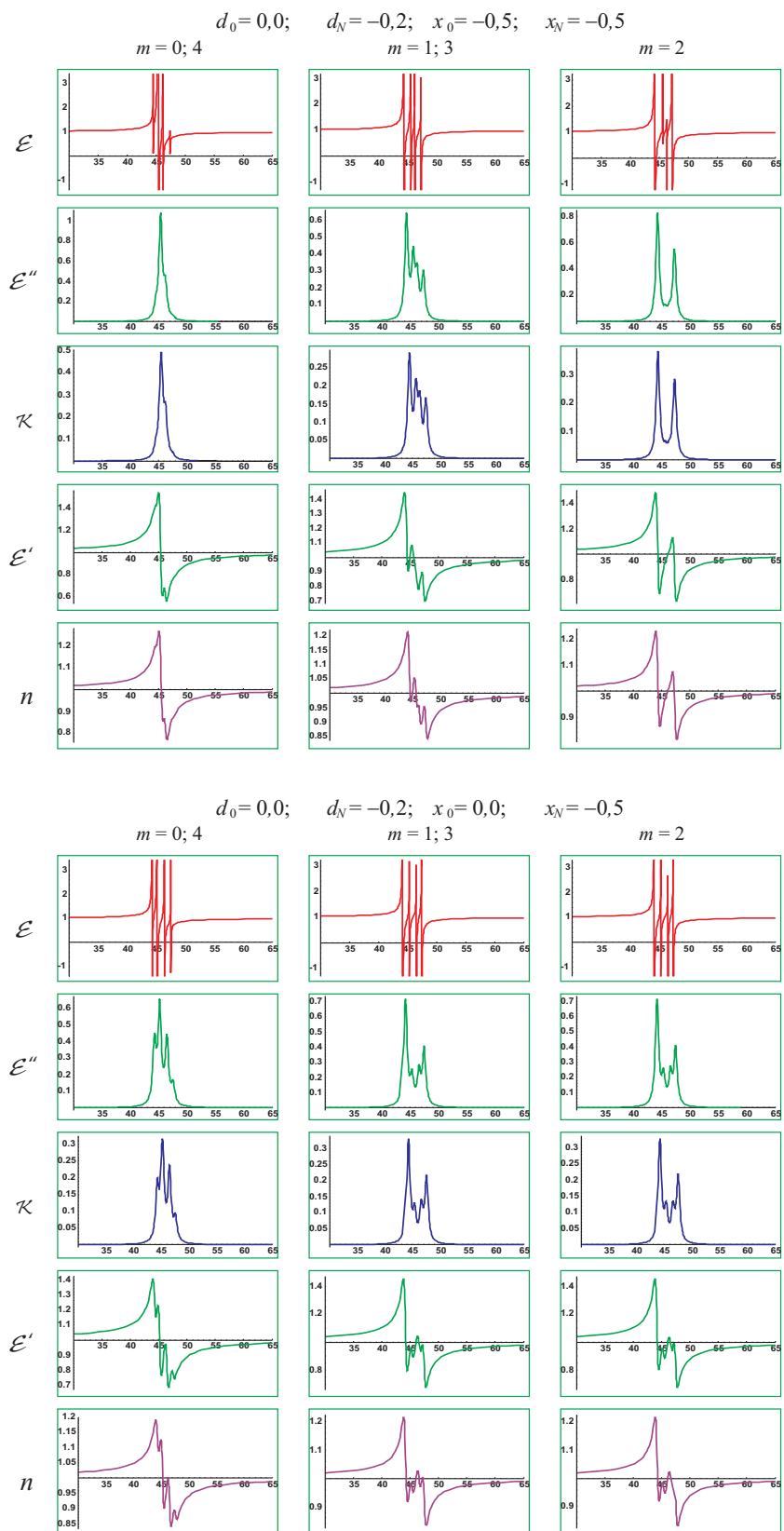
Slika 3.35: Permitivnost i indeksi prelamanja i apsorpcije molekuskog filma



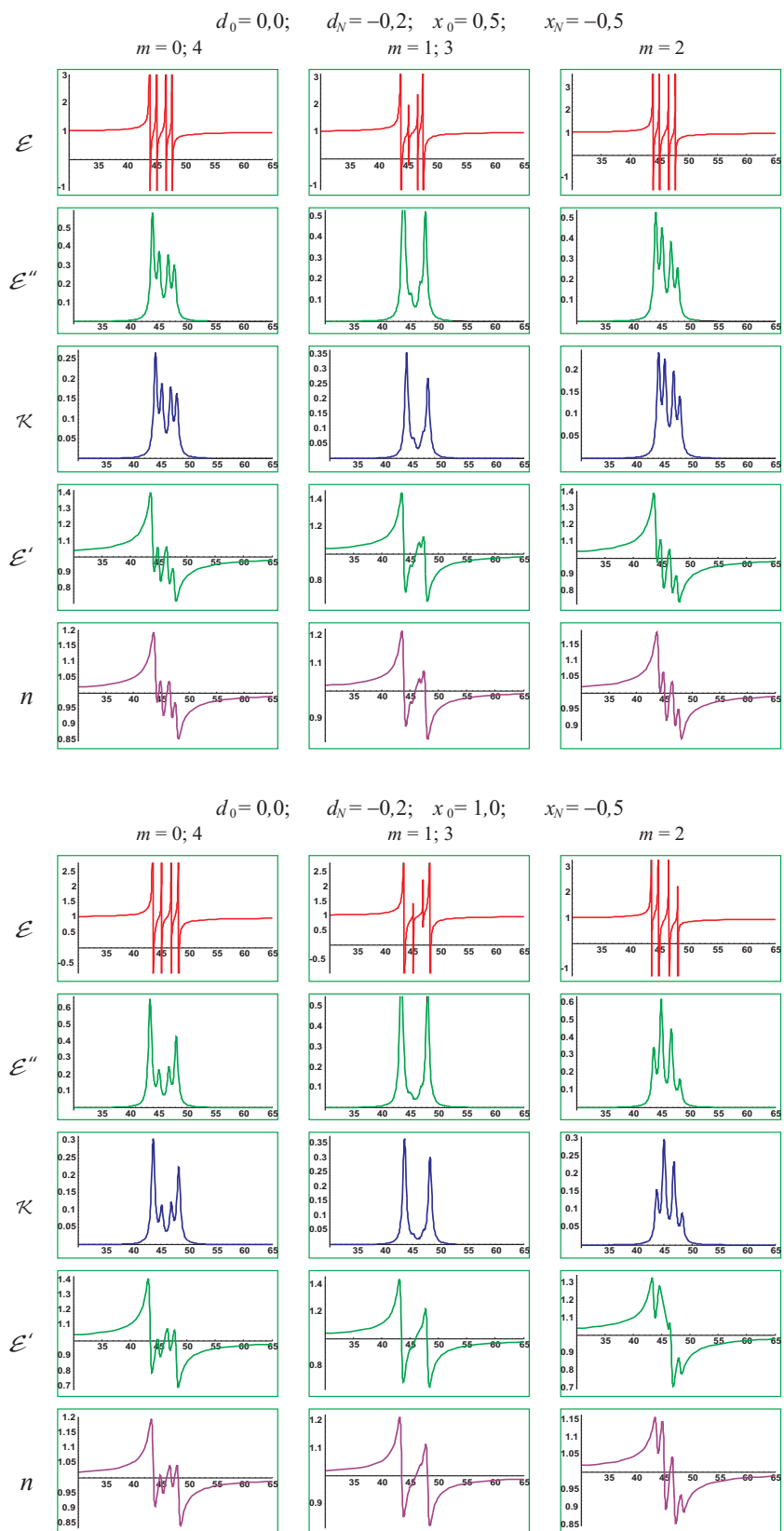
Slika 3.36: Permitivnost i indeksi prelamanja i apsorpcije molekuskog filma



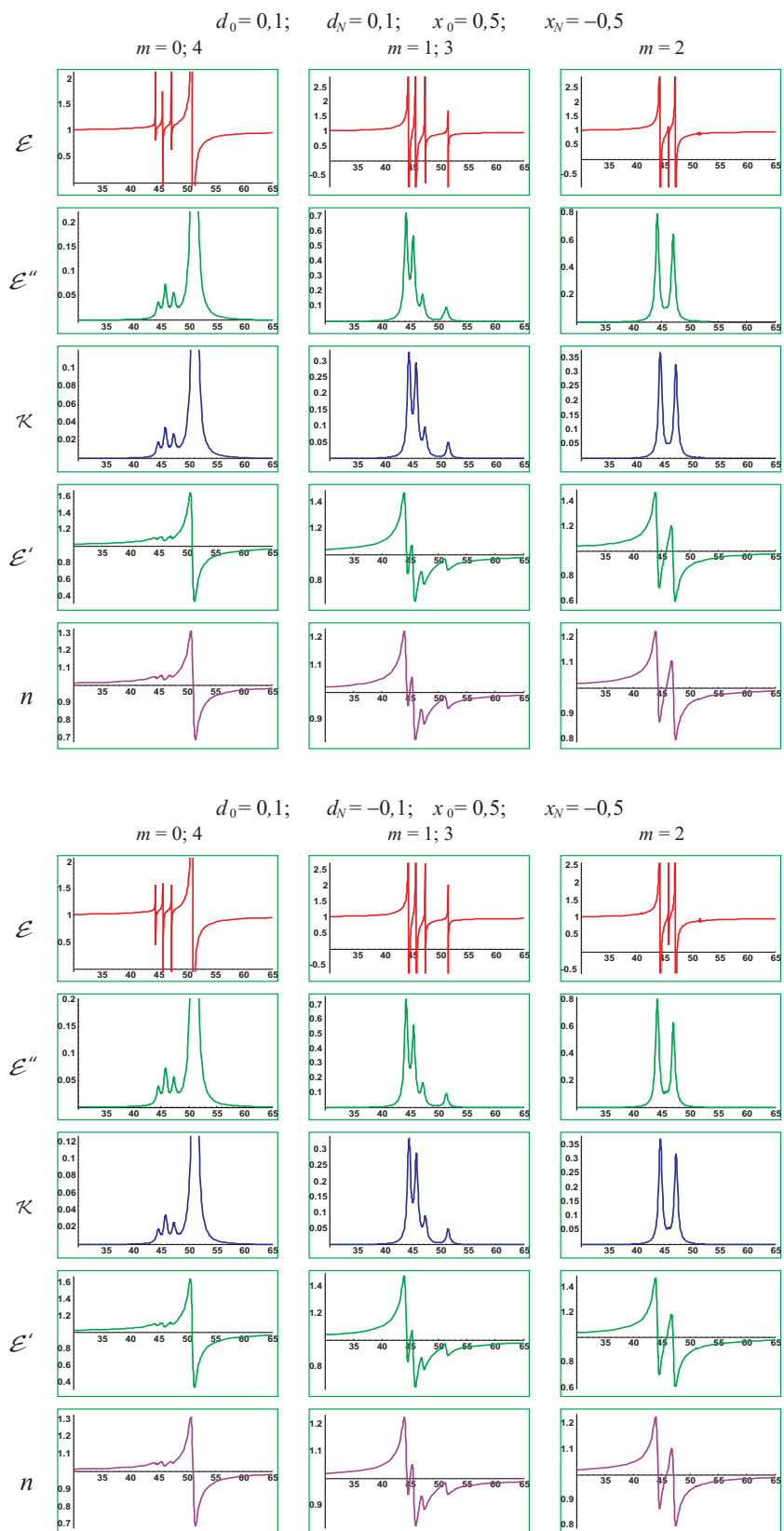
Slika 3.37: Permitivnost i indeksi prelamanja i apsorpcije molekuskog filma



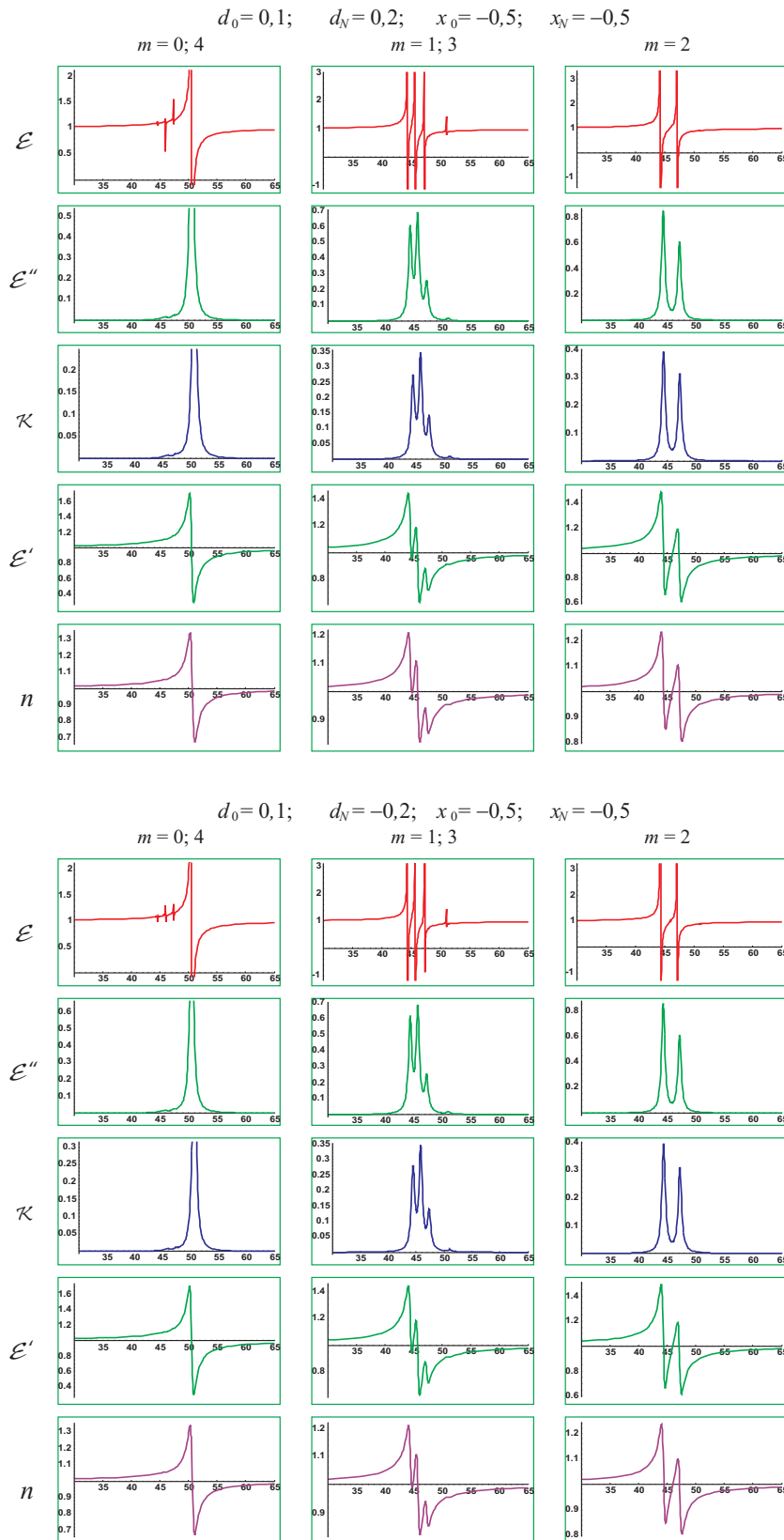
Slika 3.38: Permitivnost i indeksi prelamanja i apsorpcije molekuskog filma



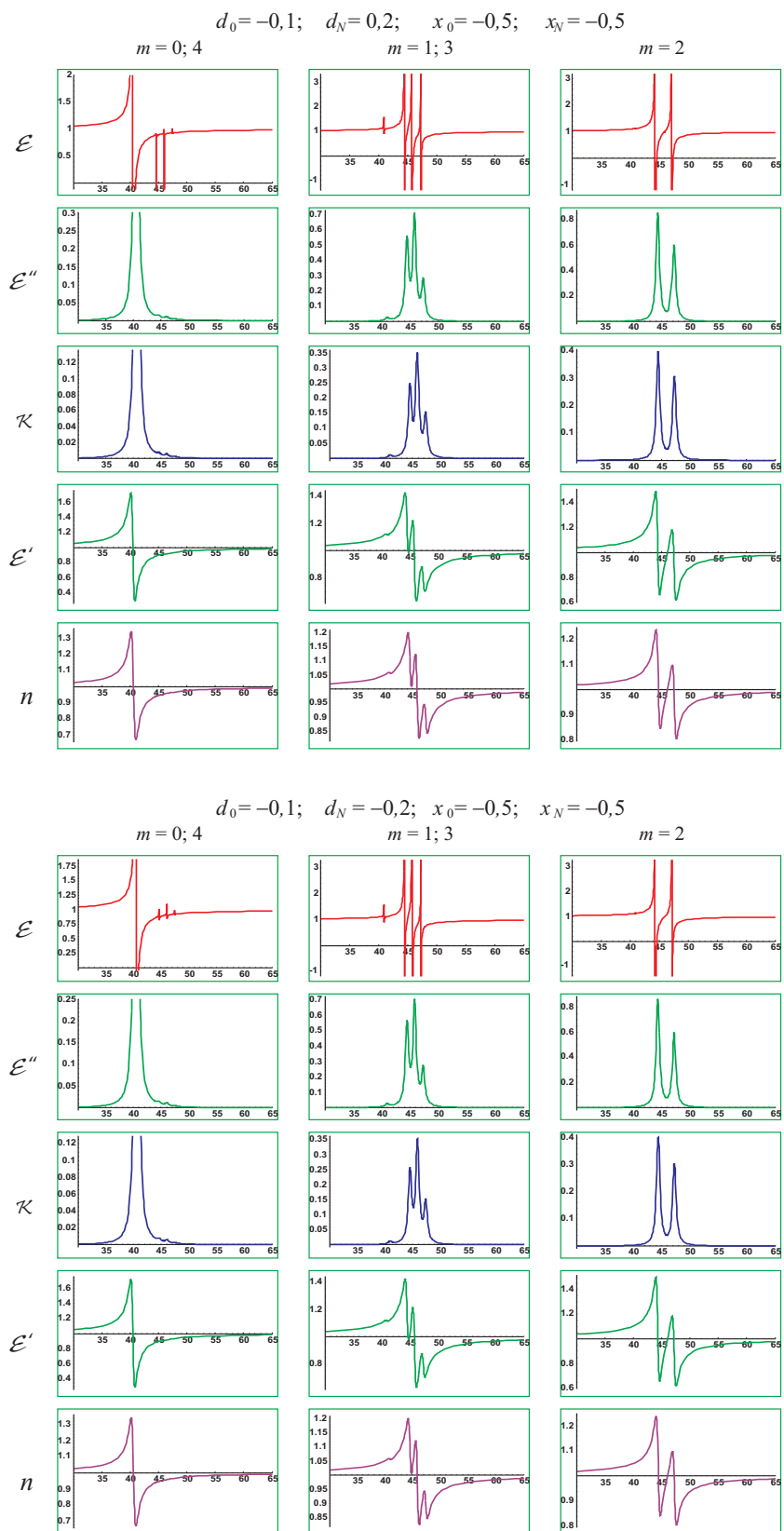
Slika 3.39: Permitivnost i indeksi prelamanja i apsorpcije molekuskog filma



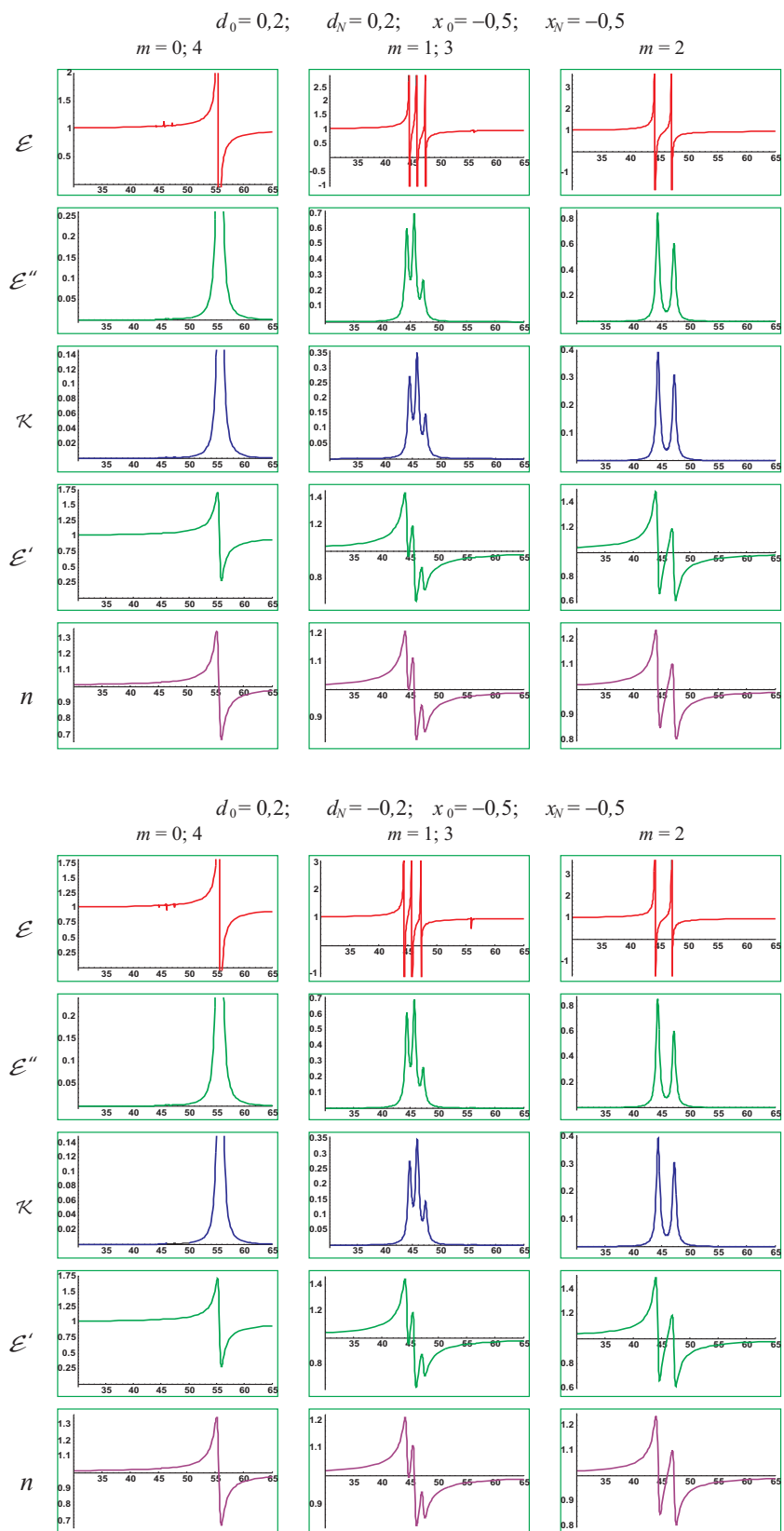
Slika 3.40: Permitivnost i indeksi prelamanja i apsorpcije molekuskog filma



Slika 3.41: Permitivnost i indeksi prelamanja i apsorpcije molekuskog filma



Slika 3.42: Permitivnost i indeksi prelamanja i apsorpcije molekuskog filma



Slika 3.43: Permitivnost i indeksi prelamanja i apsorpcije molekuskog filma

Rezultati ovih analiza su pokazali bitne razlike u dielektričnom odzivu (makroskopske, ali dimenziono-kvantne osobine) eksitona između balk i film-struktura kao isključivu posledicu ograničenosti filma duž z -pravca i postojanja perturbacija parametara na graničnim površima i graničnim slojevima strukture.

Umesto kontinualne zone apsorpcije uglavnom u IC oblasti kod molekulkih balk-struktura, kod filmova se javljaju apsorpcioni pikovi na određenim frekvencijama spoljašnjeg elektromagnetnog polja. Oni pokazuju osobinu selektivnosti, tj. pojavu diskretnih (rezonantnih) linija i apsorpcionih pikova na tačno određenim energijama, čiji broj i raspored zavisi od broja slojeva u filmu. Ove osobine daju filmovima prednost u odnosu na balk strukture (čiji je dielektrični odziv kontinualan u određenom opsegu energija), jer se u tom slučaju filmovi mogu koristiti kao svojevrsni filteri spoljašnjeg zračenja.

U prvom redu svih grafika sa slika 3.30–3.43 prikazane su zavisnosti dinamičke permitivnosti od redukovane frekvencije spoljašnjeg elektromagnetnog polja za četvoroslojni dielektrični film kada se parametar Δ menja perturbacijom d_0 (ili d_N).

„Ad hock” pregledom uočava se da sve dielektrične i optičke osobine ultratankog filma zavise od sloja do sloja i različite su za različite slojeve ultratankog filma. Međutim, veoma lakim pregledom svih datih grafika, uočava se simetrija (ustvari jednakost ili istovetnost) ponašanja dielektričnih i optičkih karakteristika na obema spoljašnjim graničnim ravnima ($n_z = 0$ i $n_z = N$), na prvim unutrašnjim slojevima tj. prvim unutrašnjim ravnima ($n_z = 1$ i $n_z = N-1$) i na središnjoj ravni ($n_z = 2$) ovog petoslojnog filma. Zbog toga je broj grafika mnogo manji nego što bi to bilo da nema ove simetrije.

Ako se posmatra zavisnost relativne permitivnosti od frekvencije spoljašnjeg elektromagnetnog polja na svim prikazanim graficima javlja se konačan broj rezonantnih pikova, jer je k_z komponenta eksitonskog talasnog vektora diskretna. Samo za određene vrednosti k_z komponente talasnog vektora (pri datim vrednostima k_x i k_y) može doći do rezonantnih pojava i apsorpcije zračenja.¹⁶

Kod posmatranog filma ($N = 4$) broj rezonantnih linija je različit za razne slojeve. Tako se javlja najmanje jedan (npr. na gornjim levim graficima na slikama 3.41, ili 3.42 i 3.43; za neke vrednosti parametra $d_{0/N}$ i na graničnim ravnima), a najviše pet (npr. desni grafici na slikama 3.30 i 3.31; za male vrednosti parametra $d_{0/N}$ i na prvim unutrašnjim slojevima). Upravo toliko koliko ima i dozvoljenih stanja duž pravca narušenja translacione simetrije, u ovom slučaju – duž z -pravca. Njihov broj zavisi i od veličine perturbacionih parametara na graničnim površima, odnosno u graničnim slojevima kristalnog filma i u direktnoj su vezi sa pojavom lokalizovanih stanja za neke određene vrednosti graničnih parametara.

Iz grafika se može uočiti da ekstremni brojevi, tj. najselektivnija rezonancija (1 linija) može nastati samo u graničnim ravnima i/ili u graničnim slojevima filma, a nikad u njegovoj unutrašnjosti. Na središnjem sloju mogu se pojaviti najmanje dve rezonantne linije (za male vrednosti parametara $d_{0/N}$), a najviše četiri (za najveće perturbacije tih parametara).

Ipak, odmah se ovde mora se podvući da pored debljine filma (tj. broja kristalografskih slojeva duž z -pravca (N), čije dejstvo je već ranije ispitano [66–70,76–79]), ovde postoje još 4 energetska parametra: d_0 i x_0 na jednoj graničnoj površi, odnosno u jednom graničnom sloju, te d_N i x_N na drugoj graničnoj površi – u drugom graničnom sloju. Ranije sprovedene analize pojedinačnog uticaja svakog od ovih parametara daju dragocene informacije o prisustvu i uticaju tzv. dimenzionog kvantovanja [80–82,86–95], ali su analize ovde kompletnije i sveobuhvatnije.

Povećanjem (odnosno, smanjenjem) parametra $d_{0/N}$ dolazi do širenja zone apsorpcije, a dominantan rezonantni pik se uočava samo na prvom sloju filma ($n_z = 0$) i to za dovoljno velike vrednosti parametra $|d_{0/N}|$. To je i očekivan rezultat, jer se iz analize spektralnih težina

¹⁶Frekvencije spoljašnjeg polja pri kojima se javljaju rezonantni pikovi dobijaju se iz uslova $\varepsilon_{n_z} \rightarrow \pm\infty$.

eksitonskih stanja vidi da je verovatnoća nalaženja eksitona na prvom sloju filma u lokalizovanom stanju veoma velika. Na ostalim slojevima ultratankog molekuskog filma ovaj rezonantni pik isčezava i to na taj način da je ovo isčezavanje sve brže kako se povećava n_z i/ili $d_{0/N}$.

Povećanjem parametra x_0 dolazi do simetričnog širenja zone apsorpcije prema višim i nižim vrednostima energija za sve slojeve, ali i do gašenja pojedinih rezonantnih pikova u zavisnosti od sloja koji posmatramo. Tako npr. svi rezonantni pikovi postoje samo za prve ($n_z = 0$ i $n_z = N$) i središnju ($n_z = 2$) ravan, dok u ostalim slojevima dolazi do gašenja unutrašnjih pikova (za $n_z = 1$ i $n_z = 3$). Povećanjem parametra $x_{0/N}$ preko određene granične vrednosti dolazi i do pojave lokalizovanih stanja (o čemu je bilo govora u prethodnom paragrafu). Smanjenjem parametra x_0 zona apsorpcije se neznatno smanjuje, a najveći efekat je na graničnim ravnima filma, gde dolazi do gašenja rezonantnih pikova na najvećim i najmanjim vrednostima energija, dok se unutrašnji pikovi međusobno skupljaju i čine veoma usku zonu. Lokalizovana stanja se tada ne pojavljuju bez obzira na veličinu $x_{0/N}$.

U drugom redu svih grafika sa slika 3.30 do 3.43, prikazane su zavisnosti imaginarnog dela relativne permitivnosti, a u trećem indeksa apsorpcije od frekvencije spoljašnjeg elektromagnetnog polja. Kako je uočljivo da je ponašanje ove dve veličine skoro istovetno jer je $\kappa \approx \sqrt{\epsilon}$. Zbog toga je i položaj apsorpcionih pikova isti, razlikuju se njihove veličine.

Poređenjem sa rezonantnim linijama permitivnosti, može se uočiti da je broj apsorpcionih pikova manji, tj. da postoje dominantne frekvencije koje će stvarno biti apsorbovane. Uglavnom postoji jedan dominantni pik, npr. gornji levi grafici na slikama 3.30; 3.43; na graničnim ravnima, s tim što je u polovini ovih slučajeva taj pik uzak za neke vrednosti parametra $x_{0/N}$, a u drugoj polovini je njihova širina veća ($x_{0/N}$ malo veće vrednosti).

Ponekad se pojave dva bliska pika, npr. središnji ili krajnji desni grafici na svim slikama 3.30 – 3.43; dakle uvek na unutrašnjim slojevima filma. Ako se na graničnim površima filma javi samo jedan diskretan (uzak) pik, onda se dva bliska javljaju na prvim unutrašnjim, a jedan prošireni na središnjoj ravni filma. Dva razdvojena apsorpciona pika na središnjoj ravni se javljaju uvek kada na graničnim ravnima i u graničnim slojevima apsorpcija nije uskopojasna, već postoji mala (uska) apsorpciona zona (npr. na slikama 3.30 i 3.31, 3.35, 3.37 i 3.39). Ovo je u potpunoj saglasnosti sa energetske spektrom eksitona, njihovim lokalizovanim stanjima i verovatnoćom pojave tih stanja.

U četvrtom redu svih grafika na slikama 3.30 – 3.43 data je zavisnost realnog dela redukovane permitivnosti, a u petom zavisnost indeksa prelamanja od redukovane frekvencije spoljašnjeg elektromagnetnog polja. Lako se uočava da je njihovo pomeranje istovetno, da imaju pikove na istim frekvencijama, samo su im veličine različite. Ovo je i normalno jer važi relacija $\kappa \approx \sqrt{\epsilon}$. Sa svih prikazanih grafika se vidi 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 sa 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.

Zavisnost indeksa apsorpcije i indeksa prelamanja od perturbacionih parametara $d_{0/N}$ i $x_{0/N}$ je slično kao i kod relativne permitivnosti i ovde je nećemo ponovo navoditi.

Treba naglasiti da je broj prikazanih grafika (na slikama 3.30 – 3.43) mnogo manji od mnogo mogućih kombinacija promena svih 5 graničnih parametara (N , $d_{0/N}$, $x_{0/N}$). Kada su analizirane moguće energije eksitona i njihova stanja, urađena je ovakva kompletna analiza. Rezultati su pokazali, a posebno i prikazani na faznim dijagramima, da postoje samo ovde prikazani – karakteristični slučajevi. I oni su svi ovde istraženi i izanalizirani.

3.6 Eksperimentalni rezultati

Rezultati ovde sprovedenih teorijskih analiza eksitonskih sistema pokazuju znatne razlike u zakonu disperzije (mikroskopske, kvantne osobine), te u dielektričnim i optičkim svojstvima (makroskopski, ali dimenziono – kvantnih osobina) eksitona između balka, nesimetričnih i simetričnih film-struktura. To nije samo posledica kvantnih efekata (kao u slučaju idealnog ili „cut-of” filma) [66–70,76–80], nego i graničnih parametara [85–95].

Relativna dielektrična permitivnost ultratankih filmova pokazuje veoma selektivne osobine, prisustvo diskretnih rezonantnih apsorpcionih pikova uspešno utvrđuje energije (frekvencije) spoljašnjeg elektromagnetnog polja čiji broj i raspodela zavisi od broja slojeva u filmu i preturbacionih parametara. Ove osobine daju prednost filmovima u odnosu na balk-strukture (čija je dinamička permitivnost neprekidna u okviru određenih opsega energije).

Ovaj rezultat može objasniti eksperimentalne činjenice u vezi sa odzivom optičkih pikova u sličnim molekulskim slojevitim nanostrukturama [96–99]. U radovima [53,100] to je evidentno u perilen-hemijskim jedinjenjima (PTCDA, PTCS I PTFE) i objašnjeno rezonantnim efektima na specifičnim rezonantnim nivoima [99–101]. Ovi efekti se manifestuju uskim optičkim apsorpcijama u UV, vidljivoj i u bliskoj IC oblasti.

Kompletan pregled optičkih osobina PBI u vidljivoj oblasti dat je u [102–104], a ovde će biti dat pregled samo najvažnijih rezultata.

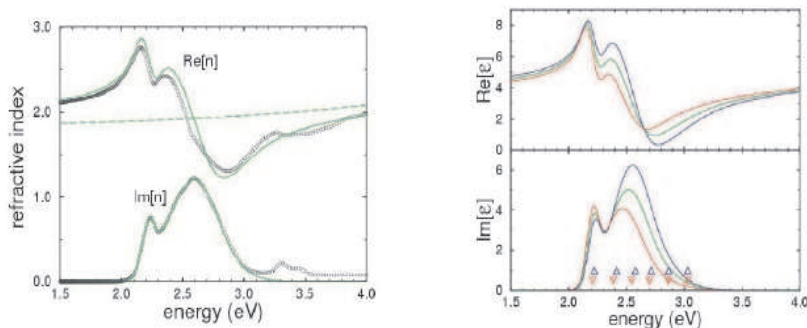
Optičke osobine organskih materijala su posledice interakcije između jake kovalentne veze u okviru svakog molekula i mnogo slabije električne i Van-der-Valsove interakcije između njih. Među mnogim proučavanjima ovakvih materijala¹⁷, mnogo je rađeno na 3,4,9,10 perylene-tetracarboxylic-dianhydride (PTCDA). Ovaj material raste na velikoj raznolikosti supstrata sa molekulima u prvom sloju podloge. PTCDA kristalizira u monocikličnu centralno-simetričnu grupu $P2_1|_c(C_{2h}^5)$ sa dva molekula po ćeliji [35,36].

Predloženo je nekoliko različitih modela da se opišu optičke osobine PTCDA kristala i tankih filmova od Vanie-Motovog eksitonskog modela [100] do eksitonskog modela malih radijusa [105,106]. Većina ovih pristupa uzima u obzir i karakteristike izolovanih molekula (unutrašnje vibracione) i transver eksitona između različitih molekulskih lokacija u kristalu. U radu [107], fokusirano je na optičku apsorpciju [53] i anizotropiju linearnog odziva posmatranog sa optičkim pobuđenjem [108], zatim na elektronsku disperziju, gubitak elektronske energije (EELS) [109] i konačno veliki Stoksov shift i neke dalje osobine fotoluminescencije (PL) spectra, uključujući oblik linije i vreme života [75].

Eksperimentalni rezultati dobijeni su na polikristalnim filmovima sa slučajnom azimutnom orijentacijom jedinice ćelije [53]. Izračunat je srednji kvaratni koren od ravanskih (XY) matricnih elemenata dielektričnog tenzora elementa: $n_{||}(\omega) \simeq \sqrt{\epsilon_{||}(\omega)}$, $\epsilon_{||}(\omega) = \frac{1}{2} [\epsilon_{xx}(\omega) + \epsilon_{yy}(\omega)]$. Pošto izmereni podaci nisu u potpunoj saglasnosti sa Kramers-Kronigovim relacijama [53], parametri su prilagođeni sa $\text{Im}[n]$ i optimizovani najmanjim kvadratima. Rezultati analiza/merjenja indeksa prelamanja i permitivnosti PTCDA filma u zavisnosti od frekvencije grafički su prikazani na slici 3.44. Levo su prikazani realni i imaginarni deo indeksa prelamanja, a desno – dijagonalne komponente dielektričnog tenzora.

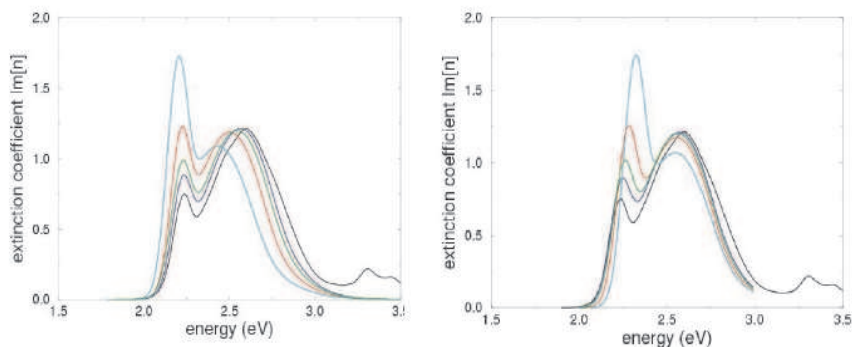
¹⁷Filmovi i nanostructure kristalnih organskih poluprovodnika su interesantni kandidati za različite tehnološke primene kao što su tranzistori sa efektom polja, solarne ćelije i organski svetleći uređaji [1–5,21–25].

Analizom dve komponente $\epsilon_{xx}(\omega)$ i $\epsilon_{yy}(\omega)$, nađene su izražene razlike između oblika linija – ovde kod filma, u odnosu na balk-strukturu. Ovo se ubedljivo vidi poređenjem koeficijenata ekstinkcije za idealan (levo) i perturbovan (desno) film za različite debljine $N = 1, 2, 4$ i 10 molekulskih slojeva sa balkovskim vrednostima koje je prikazano na slici 3.45.



Slika 3.44: Indeks prelamanja i permitivnost PTCDA filma

Ispitivanja fotoluminescencije na kristalu α -PTCDA pokazuju da se fotoluminescentni spektar na niskim temperaturama sastoji od tri različita radijativna rekombinaciona kanala sa vremenima raspada od 3, 13 i 33 ns [75]. Dominantna fotoluminescentna traka sa raspadom u okviru 13 ns može biti pripisana rekombinaciji indirektnog minimuma disperzije Frenkelovih eksitona. Posle apsorpcije, slede emisijski procesi koji uključuju ekscitacije što rezultira eksitonskim nivoima oko minimuma najnižih disperzionih grana.

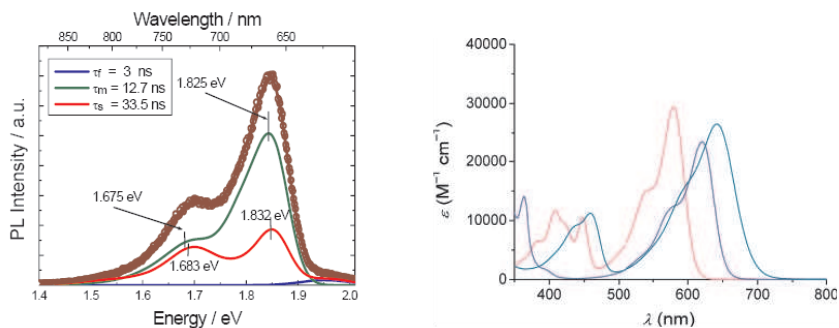


Slika 3.45: Koeficijent ekstinkcije za PTCDA filmove

Ova eksitonska svojstvena stanja sa konačnim talasnim vektorom su očigledni kandidati za crveno pomeranje fotoluminescentnog prelaza ka elektronskom osnovnom stanju. Kako elektronsko i vibraciono osnovno stanje imaju iščezavajući ukupan moment, nije dostupno kao konačno stanje nakon vertikalne radijativne rekombinacije. S toga, najniža dostupna konačna stanja nakon rekombinacije su vibraciona pobuđenja koja propagiraju istim talasnim vektorom kao i Frenkelov eksiton pre rekombinacije.

Rezultat fotoluminescentnog spektra prikazan je na slici 3.46, modelovan asimetričnim oblikom za svaku oscilatornu ravan. Posmatrano smanjenje energetske razlike između oscilatornih ravni, dobro je reprodukovano računanjem fotoluminescentnih oblika, ali relativni intenzitet ostalih ravni je malo manji. Osim toga, rezultati vremena raspada (života) su 12,6 ns za minimum gornje grane eksitona i 13 ns za donje grane, odlično se slažu sa drugim eksperimentalnim podacima.

Na slici 3.47 (uzetog iz [102]) apsorpcioni spektar tetraalkylamina NDI (Naphthalene Diimides) 8 prikazan je zajedno sa spektrom di i trialkylamina NDIs 2 i 3. S_0-S_1 ima maksimum na 620 nm, dok se pomera ka kraćim talasnim dužinama za NDI 3 do 579 nm. Dalje uvođenje alkilamino supstituenata izaziva ponovo crveno pomeranje do 642 nm za NDI 8.



Slika 3.46: Fotoluminescentni spektar za PTCDA filmove (levo)

Slika 3.47: Apsorpcioni spektar NDI 2, 3 i 8 (desno)

S toga derivat supstituisan tetraalkylamino pokazuje najduži apsorpcioni maksimum poznat do sada za NDI hromofore kod kojih je jezgro supstituisano. U poređenju sa NDI kod kojeg jezgro nije supstituisano, kao što je NDI1 koji ne ispoljavaju emisiju, svi alkalamino-substituisani su fluorescentni. Dialkalamino derivati 2 ispoljavaju kvantni prinos 42 % i povećava se za trialkalamino jedinjenja 3 do 70 % [110,111]. Uvođenje četvrtog amino substituenta smanjuje kvantni prinos do 13 % za NDI 8. Optička svojstva diamino i triamino NDI-ova 5-9 su prikazana u tabeli 3.12, gde su: λ_a – talasna dužina apsorpcionog maksimuma, ϵ – indeks apsorpcije i λ_e – talasna dužina emisionog maksimuma.

Br.NDI	boja	λ_a [nm]	ϵ	λ_e [nm]
2	plava	620	23300	650
3	ljubičasta	579	29400	605
5	žuta	427	10900	–
6	žuta	419	12200	477
7	ljubičasta	563	15400	–
8	tirkiz	642	26500	687
9	tirkiz	629	36000	646

Tabela 3.12: Optička svojstva diamino i triamino NDI-ova

U poređenju sa našim rezultatima [112–126] ovde prikazanim istraživanjima, koji spadaju u dublje IC i elektromagnetno zračenje, može se zaključiti da su relativno razlike – efekat različitih struktura kristalnih uzoraka (hemijskih i fizičkih). Dobra saglasnost u rezonantnoj apsorpciji može se pripisati i objasniti prisustvom graničnih uslova i kvantnim dimenzionim efektima. Različit broj i oblik apsorpcionih linija pojavljuju se jer smo ovde obuhvatili samo elektronski linijski spektar, a zanemarili oscilatorni i rotacioni doprinos. U tom smislu ovde je dobro definisana pozicija centralnih apsorpcionih pikova relativne permitivnosti u zavisnosti od frekvencije (energije) spoljašnjeg elektromagnetnog polja.

4 Zaključak

U ovoj disertaciji urađena su teorijska istraživanja mikroskopskih i makroskopskih efekata eksitonskih sistema u ultratankim film-strukturama i ovi rezultati upoređeni sa eksitonskim sistemima u odgovarajućim balk-strukturama molekulskih kristala. Izanaliziran je uticaj graničnih parametara filma: debljine filma ($L = Na$, gde je N broj kristalografskih ravni duž debljine filma) i parametara $d_{0/N}$ i $x_{0/N}$ koji perturbuju energije eksitona (Δ) na graničnim površima i energije transfera eksitona u graničnim slojevima filma. Sve analize su izvedene za četvoroslojni film ($N = 4$), dakle za film sa 5 kristalografskih ravni: dve granične i 3 unutrašnje.

Ovde će biti navedeni samo najvažniji rezultati.

1. Zakon disperzije eksitona u molekulskim filmovima

U prisustvu graničnih uslova određen je energetski spektar – moguće energije eksitona. Evidentirane su značajne razlike u poređenju sa neograničenim strukturama.

- (a) Disperzioni eksitonski spektar kod monomolekulskih filmova je diskretan, a broj diskretnih nivoa jednak je broju slojeva filma duž z -pravca, tj. $N + 1$. Kod balka egzistira jedna zona u kojoj eksitoni „uzimaju” sve moguće (praktično kontinualne) vrednosti energija.
- (b) Promena energije molekula na čvoru Δ na graničnim ravnima ($n_z = 0, N$), tj. perturbacionog parametra $d = d_{0/N}$, dovodi do pomeranje spektra prema višim ili nižim vrednostima energija, u zavisnosti da li je promena tog parametra pozitivna ili negativna, respektivno.

Pomeranje spektra može da dovede do toga da se jedan energetski nivo „nađe” van balkovske zone i to za relativno male promene vrednosti parametra d ($|d| \leq 0,1$). Kada je ta promena veća ($|d| > 0,1$) mogu se javiti i tri nivoa van balkovskih granica. To se dešava kada su vrednosti parametara d_0 i d_N različite i ne-asimetrične ($|d_0| \neq -|d_N|$).

U slučajevima kada su vrednosti parametara d asimetrične (iste apsolutne vrednosti, a različitog znaka) dolazi do izdvajanja dva lokalizovana stanja simetrično iznad i ispod balkovske zone. Slično se dešava kada su vrednosti parametara d_0 i d_N : jedna pozitivna, a druga negativna i različite od nule.

Na taj način formiraju se tamovska ili lokalizovana stanja eksitona u filmu.

- (c) Povećanje energetske perturbacije $x = x_{0/N}$ energije transfera eksitona (međumolekulska interakcija) u graničnim slojevima, odnosno, između graničnih i njima susednih ravni ($n_z = 0$ i $n_z = 1$, tj. $n_z = N$ i $n_z = N - 1$) dovodi do širenja spektra eksitonskih energija.

Ovo širenje može da uzrokuje „izbacivanje” dva energetska nivoa van balkovskih granica, a u ekstremnim slučajevima ($|d_{0/N}| > 0,1$) mogu se pojaviti i četiri van-balkovska stanja. Ovi nivoi – lokalizovana stanja su udaljenija od balkovske zone što je perturbacija veća, odnosno, što je parametar x veći.

Smanjenjem parametra x dolazi do neznatnog sužavanja unutrašnjih energetskih nivoa, dok širina celog spektra ostaje praktično nepromenjena bez pojave lokalizovanih stanja.

2. Distribucija eksitonskih stanja u molekulskim filmovima

Za razliku od balk struktura kod kojih se eksitoni mogu naći na bilo kom mestu sa podjednakom verovatnoćom, u ultratankim molekulskim film-strukturama verovatnoće nalaženja eksitona jako zavise od debljine filma ($L = Na$), bolje rečeno – od prostornog položaja duž širine filma, kao i od veličine perturbacionih parametara $d_{0/N}$ i $x_{0/N}$.

- (a) Da li će se eksiton naći na prvoj (donjoj) ili zadnjoj (gornjoj) graničnoj površi, u prvom ili zadnjem graničnom sloju filma ili unutar (širine) filma – u najvećoj meri zavisi od parametara $d_{0/N}$. Povećanje ovih parametara srazmerno povećava lokalizaciju eksitona na graničnim površima, a lokalizovani su eksitoni sa najvećim mogućim energijama. Lokalizacija eksitona u graničnim slojevima, ali sa najmanjim energijama, zahteva i niže (po apsolutnoj vrednosti) veličine parametara perturbacije d . Negativne vrednosti parametara perturbacije d , imaju isti uticaj na distribuciju i lokalizaciju stanja eksitona kao i pozitivne.
- (b) Lokalizaciju eksitona između graničnih i njima susednih površi određuju parametri x i to tako da povećanje tih parametara dovodi do porasta verovatnoće nalaženja eksitona u graničnim slojevima monomolekulskog filma. Negativne vrednosti parametara x ne dovode do dominantne lokalizacije eksitona na graničnim ravnima, naprotiv, one povećavaju verovatnoću balkovskih stanja – unutar, tj bliže centralnoj ravni filma.

3. Permitivnost i apsorpciona svojstva molekulskih filmova

Za razliku od eksitonskih sistema u balku molekulskih kristala, gde se, u zavisnosti permitivnosti od frekvencije, javlja kontinualna apsorpciona zona u određenom opsegu energija spoljašnjeg elektromagnetnog zračenja, kod ultratankih molekulskih film-struktura egzistiraju rezonantne linije na tačno određenim energijama. Broj ovih linija zavisi od položaja kristalografske ravni filma (n_z) za koju se izračunava permitivnost. Naravno, njihov broj jako zavisi i od graničnih perturbacionih parametara: $d_{0/N}$ i $x_{0/N}$, za zadatu debljinu filma, odnosno za zadati broj kristalografskih ravni paralelnih graničnim površima tog filma.

- (a) Kada je $d_{0/N} = 0$ broj rezonantnih linija opada na unutrašnjim slojevima filma, dok je za bilo koju konačnu vrednost perturbacije $d_{0/N} \neq 0$ broj rezonantnih linija jednak $N + 1$, s tim da može doći do „gašenja” pojedinih. Kada je $x_{0/N} = 0$ broj rezonantnih linija opada na unutrašnjim slojevima filma, dok je za bilo koju konačnu vrednost perturbacije ($x_{0/N} \neq 0$) broj rezonantnih linija jednak $N + 1$, s tim da i ovde može doći do „prigušenja” pojedinih. Ovaj zaključak ima izuzetak za prve unutrašnje kristalografske ravni $n_z = 1$ i 3 , gde se broj rezonantnih linija održava i kada $x_{0/N} \neq 0$, jer je verovatnoća da se eksiton određene energije nađe na drugoj ili četvrtoj ravni filma je jednaka nuli, bez obzira na veličinu perturbacije $x_{0/N}$.
- (b) Povećanjem (odnosno, smanjenjem) parametara d dolazi do širenja zone apsorpcije, a dominantna rezonantna linija se uočava samo na graničnom sloju filma (prvom ili zadnjem) i to za dovoljno velike vrednosti parametra $|d| \geq 0,1$. Na ostalim ravnima ultratankog molekulskog filma ova rezonantna linija iščezava i to na taj način da je ovo iščezavanje sve brže kako se povećava n_z i/ili d . Povećanjem parametara x dolazi do simetričnog širenja zone apsorpcije prema višim i nižim vrednostima energija za sve slojeve, ali i do gašenja pojedinih rezonantnih linija u zavisnosti od broja ravni ili sloja kojeg posmatramo. Smanjenjem parametara x zona apsorpcije se neznatno smanjuje, a najveći efekat je u graničnim slojevima filma, gde dolazi do gašenja rezonantnih linija sa najvećim i najmanjim vrednostima energija, dok se unutrašnje linije međusobno skupljaju i čine veoma usku zonu.

4. Optičke osobenosti molekulskih filmova

Za razliku od eksitonskih sistema u balku molekulskih kristala, gde se, u zavisnosti permi-
tivnosti od frekvencije, javlja kontinualna apsorpciona zona u određenom opsegu energija
spoljašnjeg elektromagnetnog zračenja, kod ultratankih molekulskih film-struktura egzi-
stiraju rezonantni apsorpcioni pikovi i rezonantni pikovi indeksa prelamanja na tačno
određenim energijama. Broj ovih pikova zavisi od položaja kristalografske ravni filma (n_z)
za koju se izračunava permitivnost. Naravno, njihov broj jako zavisi i od graničnih per-
turbacionih parametara: $d_{0/N}$ i $x_{0/N}$, za zadatu debljinu filma, odnosno za zadati broj
kristalografskih ravni paralelnih graničnim površima tog filma.

Odmah treba podvući da je ovaj broj pikova i njihov raspored po frekvencijama spoljašnjeg
elektromagnetnog polja u strogoj korespondenciji sa brojem i rasporedom rezonantnih linija
kod relativne dinamičke permitivnosti, ali oblik i veličina ih znatno razlikuje.

- (a) Poređenjem sa rezonantnim linijama permitivnosti, može se uočiti da je broj ap-
sorpcionih pikova manji, tj. da postoje dominantne frekvencije koje će stvarno biti
apsorbovane. Uglavnom postoji jedan dominantni pik i to na graničnim ravnima, s
tim što je u polovini ovih slučajeva taj pik uzak za neke manje vrednosti parametra
 $x_{0/N}$ ($\leq 0,5$), a u drugoj polovini je njihova širina veća kad $x_{0/N}$ uzima malo veće
vrednosti ($\geq 1,0$). Ponekad mogu da se pojave dva bliska pika, uvek na unutrašnjim
slojevima filma. Ako se na graničnim površima filma javi samo jedan diskretan (uzak)
pik, onda se dva bliska javljaju na prvim unutrašnjim, a jedan prošireni na središnjoj
ravni filma. Dva razdvojena apsorpciona pika na središnjoj ravni se javljaju uvek
kada na graničnim ravnima i u graničnim slojevima apsorpcija nije uskopojasna, već
postoji mala (uska) apsorpciona zona. Ovo je u potpunoj saglasnosti sa energetske-
m spektrom eksitona, njihovim lokalizovanim stanjima i verovatnoćom pojave tih stanja.
- (b) Svi analizirani slučajevi prikazuju 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 sa 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 ovde sprovedenih teorijskih analiza niskodimenzionih eksitonskih kristalnih sis-
tema, dakle, pokazuju znatne razlike u zakonu disperzije (mikroskopske, kvantne osobine), te
u dielektričnim i optičkim svojstvima (makroskopski, ali dimenziono – kvantnih osobina) ek-
sitona između balka, nesimetričnih i simetričnih film-struktura. To nije samo posledica kvantnih
efekata, nego i perturbacije graničnih parametara.

Pored navedenih osobenosti, uočljivo je da relativna dielektrična permitivnost ultratankih fil-
mova pokazuje veoma selektivne osobine, a prisustvo diskretnih rezonantnih apsorpcionih pikova
uspešno utvrđuje one energije (frekvencije) spoljašnjeg elektromagnetnog polja koje ce u ovom
filmu biti apsorbovane. Njihov broj i raspodela zavisi od broja slojeva u filmu i vrednosti per-
turbacionih parametara na granicama sistema. Ove karakteristike daju prednost filmovima u
odnosu na balk-strukture (čija je dinamička permitivnost i apsorpciona zona neprekidna u okviru
određenih opsega energije).

Ovaj rezultat može objasniti eksperimentalne činjenice u vezi sa odzivom optičkih pikova
u sličnim molekulskim slojevitim nanostrukturama – perilen-hemijskim jedinjenjima (PTCDA,
PTCS I PTFE), gde je ovo evidentirano i objašnjeno rezonantnim efektima na specifičnim lokali-
zovanim eksitonskim nivoima.

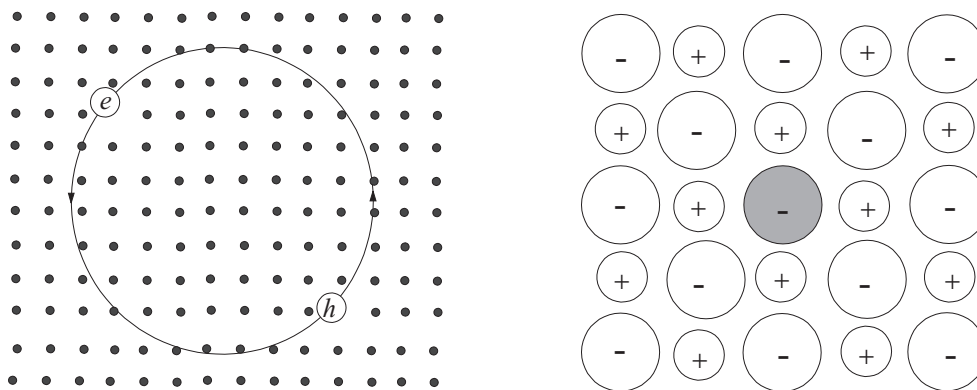
5 Dodatak

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 alaknlog halogenida. Jedan idealan Frenkelov eksiton će prolaziti kroz ceo kristal kao talas, ali elektron će uvek biti u neposrednoj blizini šupljine.



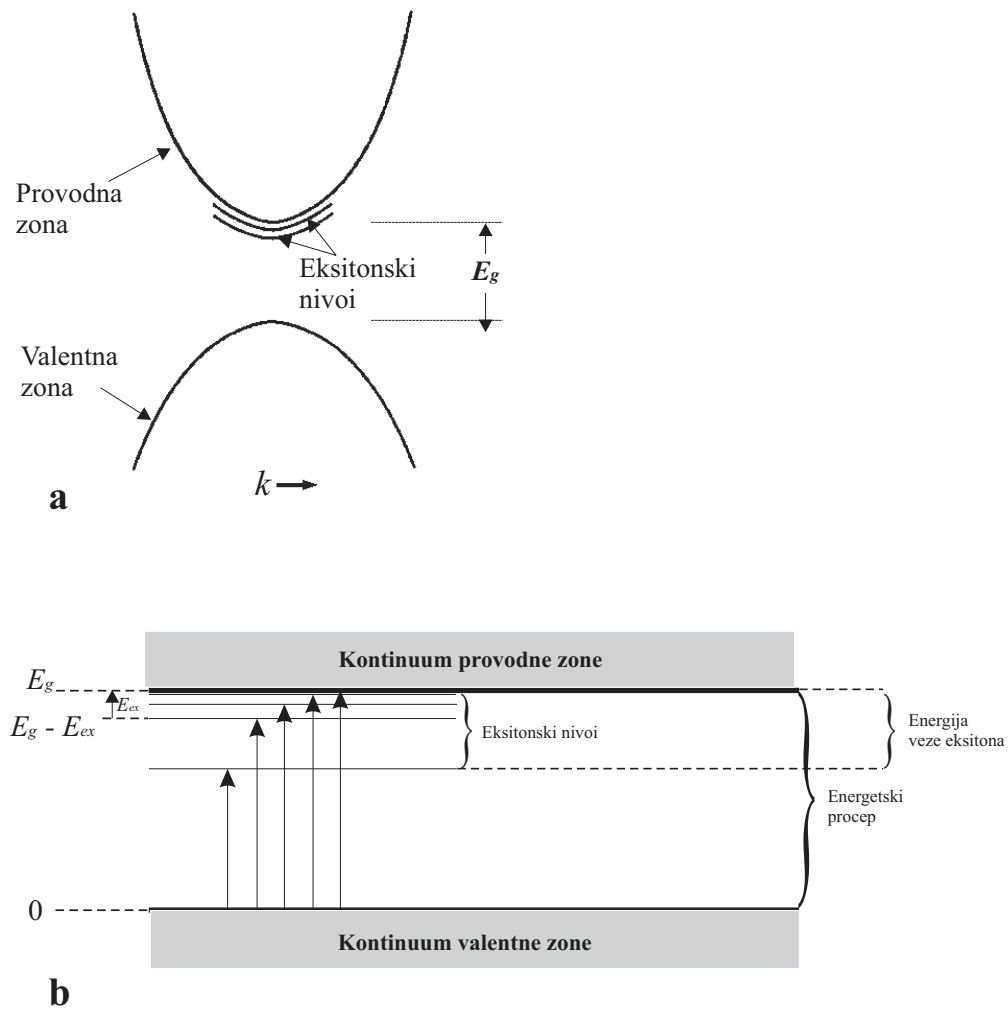
Slika 5.1: Eksiton Vanije-Mota (a) i Frenkelov eksiton (b)

Eksiton se može kretati kroz kristal i prenositi energiju, ali eksiton ne prenosi naelektrisanje, jer je električno neutralan. On je sličan pozitronijumu koji je sastavljen od elektrona i pozitrona. Eksiton može biti formiran u svakom izolatoru. Kada je vezani gep indirektni eksitoni u blizini direktnog gepa mogu biti nestabilni, pa se raspadaju u slobodni elektron i slobodnu šupljinu¹⁸. Eksitoni mogu formirati i komplekse, kao što su bieksitoni – kreirani od dva eksitona.

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

¹⁸Svi eksitoni su nestabilni i imaju relativno malo vreme života (singletni 10^{-8} s, a tripletni i do 10^{-3} s).

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



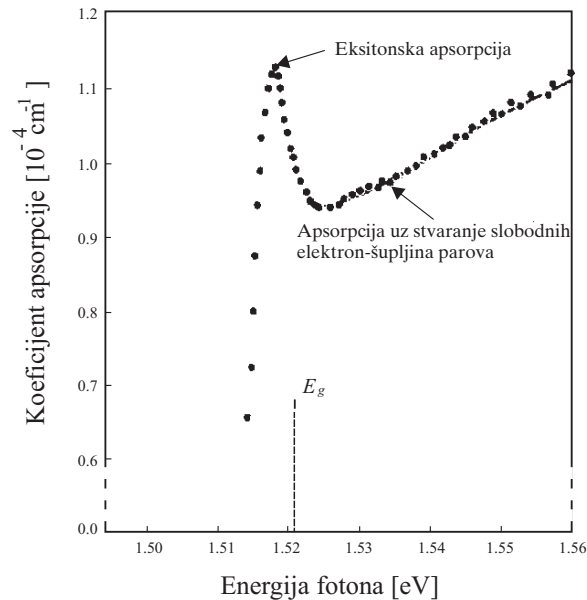
Slika 5.2: Energetski nivoi eksitona

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

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 (slika 5.3).
2. Iz luminescencije prilikom rekombinacije, upoređivanjem energije potrebne za rekombinaciju para elektron - šupljina i energije eksitacione rekombinacije.
3. Fotojonizacijom eksitona kada nastaju slobodni nosioci. Ovaj eksperiment zahteva visoku koncentraciju eksitona.

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.



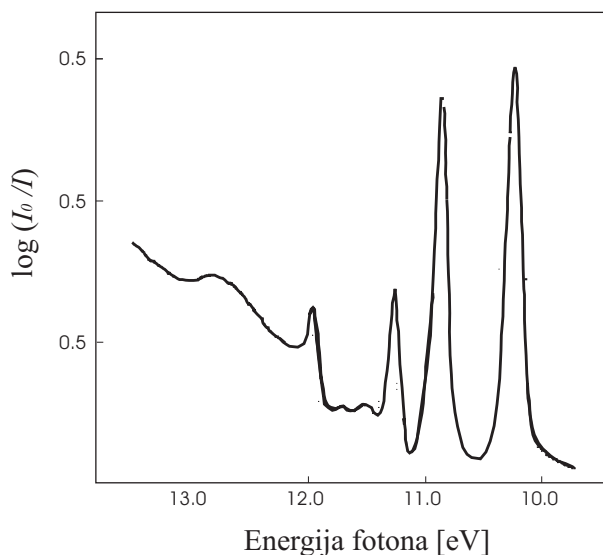
Slika 5.3: Apsorpciona kriva za GaAs

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 između 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 molekuskog 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) pobuđenje 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 pobuđeno stanje atoma, ali pobuđenje 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 gep u kristalu iznosi 11.7 eV, tako da je energija osnovnog stanja elektrona 11.7 eV - 10.17 eV = 1.5 eV i ona se raspodeljuje na slobodan elektron i slobodnu šupljinu odvojeno, kao i na ostatak kristala.



Slika 5.4: Apsorpciona kriva kristalnog kriptona na 20 K

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:

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

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

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

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 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. Kao što će biti pokazano, svojstvena stanja će tada imati talasnu formu.

Kada hamiltonijan sistema deluje na funkciju sa j -tim pobuđenim 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 udeo transfera pobuđenja od j -tog atoma do njegovih najbližih suseda $j-1$ i $j+1$. Rešenja prethodne jednačine su talasi Blohovog oblika:

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

Pustimo da operator H deluje na ψ_k :

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

Sređivanjem desne strane sledi:

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

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 ekscitacione nivoe 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 vakumskoj ultraljubičastoj oblasti spektra zračenja.

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

Molekulski kristali

U molekulskim kristalima kovalentna veza unutar molekula je mnogo jača od Van der Walsovih veza između molekula, tako da se javljaju Frenkelovi eksitoni. Elektronska pobuđenja na individualnom molekulu se pojavljuju u kristalu kao eksitoni, često sa malim pomerajem u frekvenciji. Na niskim temperaturama linije u kristalu su relativno oštre, iako može biti više linijska struktura u kristalu nego u molekulu, zbog Davidovog cepanja. Davidov je pokazao da ako postoji σ molekula sa nedegenerisanim nivoima u elementarnoj ćeliji, svaka zona se cepa na σ zona. Drugo cepanje je Beteovo - ako je nivo na koji se molekul pobuđuje 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 energetske nivou nedegenerisani. Energetski nivou vrha valentne zone dati su modifikovanom Ridbergovom jednačinom:

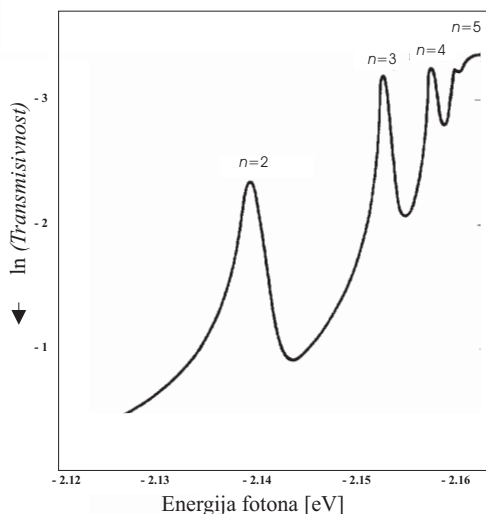
$$E_n = E_g - \frac{\mu e^4}{2\hbar^2 \epsilon^2 n^2}, \quad (5.10)$$

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 eksitonski 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 energetske 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 energetske gep $E_g = 2,17 \text{ eV}$.

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 između 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]:

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

Ovde, a i u daljem tekstu, ponovljeni indeks zamenjuje oznaku sumiranja, tj. $\sum_j A_{ij} X_j \equiv A_{ij} X_j$.

Veličine $\tilde{\varepsilon}_{\alpha\beta}$ predstavljaju tenzor dielektrične permitivnosti. Materijalna jednačina (5.12) dobija mnogo prostiji oblik ako se izrazi u Furije komponentama veličina \vec{E} , \vec{D} i $\tilde{\varepsilon}$.

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:

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

relacija (5.12) postaje:

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

gde je:

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

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

Tenzor $\varepsilon_{\alpha\beta}(\vec{k}, \omega)$ 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 elektromagnetnog 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 elektromagnetnog 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 $\varepsilon_{\alpha\beta}(\vec{k}, \omega)$ ugrade i mikrodinamika i strukturne karakteristike sredine. Teškoće stvara činjenica da su operatori elektromagnetnog polja u sredini linearni funkcionali operatora koji kreiraju i anihiliraju pobuđenja 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 Džalošinskog 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 elektromagnetnog polja sa spoljašnjim strujama, koja u slučaju diskretne 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 pobuđenja u kristalu. Kao što iz predašnjeg vidi hamiltonijan tipa (5.19) odgovara eksitonskom sistemu za slučaj dvonivovske šeme molekularnih pobuđenja ili sistema feroelektričnih pobuđenja 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 energetskeim 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 $\langle \hat{A}_\alpha(\vec{n}, t) \rangle_0$ takođe jednaka nuli. Ako ovo uzmemo u obzir i srednju vrednost (5.20) sračunamo u aproksimaciji linearnoj 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 elektromagnetnog polja u kristalu $\left(\int d^3\vec{k} e^{i\vec{k}(\vec{r}-\vec{r}')} \rightarrow \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{n}')} \right)$, uz pretpostavku 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 (definisana je do na gradijent neke skalarne funkcije), Grinova funkcija $\Phi_{\alpha\beta}(\vec{n} - \vec{n}'; t - t')$ u kojoj figurišu komponente vektorskog potencijala, takođe predstavlja gradijentno neinvarijantnu veličinu. Na osnovu relacije:

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

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 eksplicitno ne figurišu mikrokarakteristike kristala. Pošto su u ove karakteristike uključene Grinove funkcije komponovane od operatora P^+ i P koji kreiraju i anihiliraju elementarna pobuđena 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 matricni elementi ravni 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 pobuđeno stanje f pod dejstvom komponente električnog polja E_α u elementarnoj ćeliji kristala i τ_0 -zapremina elementarne ćelije 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 pobuđenja 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 pobuđena, srednje brojeve pobuđena, polarizacije itd.).

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

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

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 Maksimalnim jednačinama i može se izraziti preko tenzora dielektrične permitivnosti $\varepsilon_{\alpha\beta}(\vec{k}, \omega)$.

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

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

$$\text{rot}\vec{E}(\vec{r}, t) = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}(\vec{r}, t)}{\partial t}$$

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

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

$$\vec{E}(\vec{k}, \omega) = \frac{i\omega}{c} \vec{A}(\vec{k}, \omega)$$

$$D_\alpha(\vec{k}, \omega) = \varepsilon_{\alpha\beta}(\vec{k}, \omega) E_\beta(\vec{k}, \omega)$$

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 tenzoru $\Delta_{\alpha\beta}$.

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

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

koja predstavlja traženu vezu između 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 ćelije 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 između dielektrične permitivnosti $\varepsilon(\omega)$ i Grinove funkcije Γ :

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

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

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

6 Literatura

1. Ch.Joachim and L.Plevert:
NANOSCIENCES – THE INVISIBLE REVOLUTION
World Scientific, Singapore 2009.
2. Guozhong Cao:
NANOSTRUCTURES AND NANOMATERIALS
SYNTHESIS, PROPERTIES AND APPLICATIONS
World Scientific, Singapore 2004.
3. Ajay Kumar Saxena:
HIGH-TEMPERATURE SUPERCONDUCTORS
Springer, Berlin – Heidelberg 2010.
4. T.Pavlović i D.Čabrić:
FIZIKA I TEHNIKA SOLARNE ENERGETIKE
Građevinska knjiga, Beograd 1999.
5. M.Lambić, T.Pavlović, J.Šetrajić i V.Sajfert:
SUNČEVA ENERGIJA – TEHNIČKI, EKONONSKI I ORGANIZACIONI ASPEKTI KORIŠĆENJA
DIT V (12–13), Zrenjanin 1999.
6. J.P.Šetrajić:
ENERGETSKI RESURSI
POTENCIJALI I PERSPEKTIVE
Zbornik radova 3. Meunarodno savetovanje o dostignuima elektro i mainske industije (DEMI), 207-210 (2000).
7. K.A.Phillips,
THE INTERSECTION OF BIOTECHNOLOGY AND PHARMACOGENOMICS
HEALTH POLICY IMPLICATIONS
Health Affairs **25**(5), 1271-1280 (2006).
8. K.J.Morrow, R.Bawa and C.Wei:
RECENT ADVANCES IN BASIC AND CLINICAL NANOMEDICINE
Med. Clin.N.Am. bf 91, 805-843 (2007).
9. V.V.Schmidt:
THE PHYSICS OF SUPERCONDUCTORS
Springer, Berlin 1997.
10. J.P.Šetrajić:
SUPERPROVODNOST
Zmaj, Novi Sad 2001.
11. A.L.Kuzemsky, I.G.Kuzemskaya and A.A.Chegolkov:
ROLE OF LAYERED STRUCTURE FOR SUPERCONDUCTING
CRITICAL TEMPERATURE OF THE MERCUROCUPRATES
OIYaI, E17-98-267, Dubna (1998).
12. J.P.Šetrajić:
SUPERCONDUCTIVITY AND FULLERENES
Materials Science Forum **282-283**, 71-82 (1998).
13. V.M.Zorić, J.D.Zorić, M.Lambić, S.M.Stojković i J.P.Šetrajić:
DIZAJN I TANKI PREMAZI GORNJE POVRŠINE SOLARNIH FOTONAPONSKIH ČELIJA
Zbornik radova 3. DEMI, 127-130 (2000).
14. S.Pejovnik, R.Dominko, M.Bele, M.Gaberšček and J.Jamnik:
ELECTROCHEMICAL BINDING AND WIRING IN BATTERY MATERIALS
J.Power Sources **184**/2, 593 (2008).
15. S.Shriram, N.G.Renganathan, M.Ganesan and M.V.T.Dhananjeyan:
THEORETICAL PREDICTION OF STATE OF CHARGE OF LITHIUM ION CELLS
Journal of Electroanalytical Chemistry **576**, 43 (2005).
16. Y.Charles Cao:
NANOMATERIALS FOR BIOMEDICA APPLICATIONS
Nanomedicine **3**(4), 467-469 (2009).

17. R.B.Gupta and U.B.Kompella:
NANOPARTICLE TECHNOLOGY FOR DRUG DELIVERY
Taylor & Francis, New York 2006.
18. R.Bawa:
PATENTS AND NANOMEDICINE
Nanomedicine **2**(3), 351374 (2007).
19. B.Basu, D.S.Katti and A.Kumar:
ADVANCED BIOMATERIALS
FUNDAMENTALS, PROCESSING, AND APPLICATIONS
Wiley, Berlin 2009.
20. BIOMATERIJALI
Ur. D.Raković i D.Uskoković
Institut tehničkih nauka SANU i MRS Serbia, Beograd 2010.
N.Ignjatović i D.Uskoković:
KOMPOZITNI BIOMATERIJALI,
gl.20 u: BIOMATERIJALI, ur. D.Raković i D.Uskoković
Institut tehničkih nauka SANU i MRS Serbia, Beograd 2010.
21. B.S.Tošić, J.P.Šetrajić, R.P.Đajić and D.Lj.Mirjanić:
PHONONS IN BROKEN-SYMMETRY STRUCTURES
Phys.Rev.B **36**, 9094-9097 (1987).
22. S.M.Stojković, D.Lj.Mirjanić, J.P.Šetrajić, D.Šijačić and I.K.Junger:
SPECTRA AND STATES OF ELECTRONS
IN SURFACE PERTURBED QUANTUM WIRES
Surface Science **477**, 235-242 (2001).
23. V.I.Gavrilenko:
THE OPTICS OF NANOMATERIALS
World Scientific, Singapore 2007.
24. B.S.Tošić:
STATISTIČKA FIZIKA
Institut za fiziku PMF, Novi Sad 1978.
25. V.M.Agranovich and V.L.Ginzburg:
CRYSTALOPTIC WITH SPACE DISPERSION AND THEORY OF EXCITONS
Nauka, Moskva 1979.
26. U.Kozmidis-Luburić, B.S.Tošić:
OPTIČKA POBUĐENJA U MATERIJALNIM SREDINAMA
Univerzitet u Novom Sadu, Novi Sad 2000.
27. V.M.Agranovich:
TEORIJA EKSITONOV
Nauka, Moskva 1968.
28. G.Mahan:
MANY PARTICLE PHYSICS
Plenum Press, New York 1990.
29. L.C.Andreani:
OPTICAL TRANSITIONS, EXCITONS, AND POLARITONS IN BULK
AND LOW-DIMENSIONAL SEMICONDUCTIVE STRUCTURES,
in: CONFINED ELECTRONS AND PHOTONS, NEW PHYSICS AND APPLICATIONS,
Vol.340 of NATO ASI Series B, pp.57-112, Eds. E.Burstein and C.Weisbuch,
Plenum Press, New York 1995.
30. L.L.Chang and L.Esaki:
SEMICONDUCTOR QUANTUM HETEROSTRUCTURES
Physics Today **45**(10), 36-43 (1992).
31. M.G.Cottam and D.R.Tilley:
INTRODUCTION TO SURFACE AND SUPERLATTICE EXCITATIONS
Univ.Press, Cambridge 1989.
32. S.G.Davison and M.Steslicka:
BASIC THEORY OF SURFACE STATES
Clarendon Press, Oxford 1996.

33. B.S.Tošić, V.D.Sajfert, D.Popov, J.P.Šetrajčić i D.Čirić:
PRIMENA DIFERENCNOG RAČUNA U ANALIZI NANOSTRUKTURA
Vojvođanska akademija nauka i umetnosti (VANU), Novi Sad 2005.
34. S.Vučenović:
DIELEKTRIČNE OSOBINE MOLEKULSKIH NANOKRISTALNIH STRUKTURA
MR teza ETF, Beograd 2003.
35. I.Vragović, R.Scholz and M.Schreiber:
MODEL CALCULATION OF THE OPTICAL PROPERTIES OF 3,4,9,10-PERYLENE-
TETRACARBOXYLIC-DIANHYDRIDE (PTCDA) THIN FILMS
Europhysics Letters **57**(2), 288294 (2002).
36. I.D.Vragović, J.P.Šetrajčić and R.Scholz
QUANTUM SIZE EFFECTS IN THE OPTICAL PROPERTIES
OF ORGANIC SUPERLATTICES CONTAINING 3,4,9,10 PERYLENE
TETRACARBOXYLIC DIANHYDRIDE (PTCDA)
Eur.Phys.J.B **66**, 185-190 (2008).
37. D.S.Sondheimer:
GREEN'S FUNCTIONS FOR SOLID STATE PHYSICS
Benjamin, New York (1974).
38. E.N.Economou:
GREEN'S FUNCTIONS IN QUANTUM PHYSICS
Springer, Berlin 1979.
39. G.Rickayzen:
GREEN'S FUNCTIONS AND CONDENSED MATTER,
Academic Press, London 1980.
40. J.P.Šetrajčić, D.I.Ilić, B.Markoski, A.J.Šetrajčić,
S.M.Vučenović, D.Lj.Mirjanić, B.Škipina and S.S.Pelemiš:
ADAPTING AND APPLICATION OF THE GREEN'S FUNCTIONS METHOD
ONTO RESEARCH OF THE MOLECULAR ULTRATHIN FILM OPTICAL PROPERTIES
15th Central European Workshop on Quantum Optics (CEWQO), Belgrade 2008.
41. I.Frenkel:
ON THE TRANSFORMATION OF LIGHT INTO HEAT IN SOLIDS
Phys.Rev. **37**, 1276-1294 (1931).
42. A.S.Davydov:
THEORY OF ABSORPTION SPECTRA OF MOLECULAR CRYSTALS
Ukr.J.Phys. **53** Special Issue – ISSN 2071-0194 (2008).
43. A.S.Davydov:
THEORY OF MOLECULAR EXCITONS, *Plenum Press*, New York (1971).
44. V.M.Agranovich, B.S.Toshich:
COLLECTIVE PROPERTIES OF FRENKEL EXCITONS
Zh.Eksp.Teor.Fiz. **53**, 149 (1967).
45. B.S.Tošić, S.D.Stojanović, M.J.Škrinjar, D.V.Kapor, Lj.D.Mašković i J.P.Šetrajčić:
BOZONSKE REPREZENTACIJE SPINSKIH OPERATORA
U TEORIJSKOJ FIZICI ČVRSTOG STANJA *SFIN* **5**(2), 27-49 (1992).
46. C.Kittel:
INTRODUCTION TO SOLID STATE PHYSICS
Wiley & Sons, New York (1971).
47. I.E.Dzyaloshinski, L.P.Pitaevski,
Zh.Eksp.Teor.Fiz. **36**, 1797 (1959).
Soviet Phys. JETP **9**, 1282 (1959).
48. M.Combescot and W.Pogosov:
MICROSCOPIC DERIVATION OF FRENKEL EXCITONS IN SECOND QUANTIZATION
Phys.Rev.B **77**(085206), 1-13 (2008).
49. V.M.Agranovich, K.Schmidt and K.Leo:
SURFACE STATES IN MOLECULAR CHAINS WITH STRONG MIXING
OF FRENKEL AND CHARGE-TRANSFER EXCITONS
Chem.Phys.Lett. **325**, 308-316 (2000).

50. D.Raković:
FIZIČKE OSNOVE I KARAKTERISTIKE
ELEKTROTEHNIČKIH MATERIJALA
Elektrotehnički fakultet, Beograd 1997. (str. 114-121)
51. I.SUPEK:
TEORIJSKA FIZIKA I STRUKTURA MATERIJE – II
Školska knjiga, Zagreb 1977. (str. 755)
52. J.M.ZIMAN:
PRINCIPLES OF THE THEORY OF SOLIDS
Cambridge 1972. (pp. 255-266)
53. A.B.Đurišić, T.Fritz and K. Leo:
MODELING THE OPTICAL CONSTANTS OF ORGANIC THIN FILMS:
APPLICATION TO 3,4,9,10-PERYLENETETRARCOXYLIC DIANHYDRIDE (PTCDA)
Optics Communications **183**, 123-132 (2000).
54. Agilent Literature Number 5980-2862EN:
SOLUTIONS FOR MEASURING PERMITTIVITY AND PERMEABILITY
WITH LCR METERS AND IMPEDANCE ANALYZERS
, *Application Note 1369-1*, May 6, 2003.
55. M.Honda:
THE IMPEDANCE MEASUREMENT HANDBOOK –
A GUIDE TO MEASUREMENT TECHNOLOGY AND TECHNIQUES
Hewlett-Packard, Yokogawa (Japan) 1989.
56. Ch.A.Harper:
HANDBOOK OF COMPONENTS FOR ELECTRONICS
McGraw-Hill, Columbus (USA) 1977.
57. F.M.Reze and S.Seely:
MODERN NETWORK ANALYSIS
McGraw-Hill, Columbus (USA) 1959.
58. D.L.Schiling and Ch.Belove:
ELECTRONIC CIRCUITS
McGraw-Hill, Columbus (USA) 1979.
59. Application Note 339-10:
USING THE VECTOR IMPEDANCE METERS
Hewlett-Packard, Yokogawa (Japan) 1986.
60. Lj.Živanov:
DIELEKTRIČNE OSOBINE MAGNETOPLUMBITA U MIKROTALASNOJ
I DALEKOJ INFRACRVENOJ OBLASTI ELEKTROMAGNETSKOG SPEKTRA
Dr. dis. *ETF Beograd 1989.*
61. T.Ivetić, M.V.Nikolić, M.Slankamenac, M.Živanov, D.Minić, P.M.Nikolić, M.M.Ristić:
INFLUENCE OF Bi_2O_3 ON MICROSTRUCTURE AND
ELECTRICAL PROPERTIES OF ZnO-SnO_2 CERAMICS
Science of Sintering —[bf 39(3) 229-240 (2007).
62. M.P.Slankamenac, S.R.Lukić, F.Skuban, I.O.Gut, M.Živanov:
INFLUENCE OF ELECTRICAL CONTACTS ON MEASUREMENT OF ELECTRICAL
CONDUCTIVITY OF AMORPHOUS SEMICONDUCTORS FROM THE SYSTEM Cu-As-Se-I
Journal of Research in Physics **31**(1), 61-67 (2007).
63. M.G.Cottam and D.R.Tilley:
INTRODUCTION TO SURFACE AND SUPERLATTICE EXCITATIONS
University Press, Cambridge (1989).
64. S.G.Davison and M.Steslicka:
BASIC THEORY OF SURFACE STATES
Clarendon Press, Oxford (1996).
65. M.Pruton:
INTRODUCTION TO SURFACE PHYSICS
Calnerdon, Oxford (1995).

66. S.B.Lazarev:
TEORIJSKA ISTRAŽIVANJA ELEKTRIČNIH I MAGNETNIH
SVOJSTAVA TANKIH FILMOVA,
Doktorska disertacija, *Prirodnomatemički fakultet*, Novi Sad 1997.
67. I.Vragović:
SPEKTRI I STANJA EKSITONA I DIELEKTRIČNE OSOBINE
MOLEKULSKIH KRISTALNIH FILMOVA
Mr teza ETF, Beograd (1999).
68. S.Vučenović:
DIELEKTRIČNE I OPTIČKE OSOBINE
SLOJEVITIH MOLEKULSKIH NANOSTRUKTURA
Dr disertacija – PMF, Banja Luka (2009).
69. S.M.Vučenović, J.P.Šetrajčić, S.S.Pelemiš, B.S.Tošić, D.Lj.Mirjanić:
DIELECTRIC PROPERTIES OF MOLECULAR CRYSTALLINE FILMS
IEEE – Proceedings 24th MIEL 1, 279-282 (2004).
70. S.S.Pelemiš, B.Škipina, S.M.Vučenović, D.Lj.Mirjanić i J.P.Šetrajčić:
APSORPCIJA KOD MOLEKULSKIH NANOFILMOVA
6. Konferencija mladih istraživača (KMI), Beograd 2007.
71. D.S.Mitrinović, D.Mihajlović i P.M.Vasić:
LINEARNA ALGEBRA, POLINOMI, ANALITIČKA GEOMETRIJA
Građevinska knjiga, Beograd (1990).
72. D.S.Mitrinović:
UVOD U SPECIJALNE FUNKCIJE *Naučna knjiga*, Beograd (1989).
73. J.P.Šetrajčić, D.I.Ilić, B.Markoski, A.J.Šetrajčić,
S.M.Vučenović, D.Lj.Mirjanić, B.Škipina and S.S.Pelemiš:
ADAPTING AND APPLICATION OF THE GREEN'S FUNCTIONS METHOD ONTO
RESEARCH OF THE MOLECULAR ULTRATHIN FILM OPTICAL PROPERTIES
15th Central European Workshop on Quantum Optics (CEWQO), Belgrade 2008.
74. D.B.Balagurov, G.C.La Rocca and V.M.Agranovich:
COHERENT-POTENTIAL-APPROXIMATION STUDY OF EXCITONIC ABSORPTION
IN ORIENTATIONALLY DISORDERED MOLECULAR AGGREGATES
arXiv:cond-mat/0302312v2 27 Dec. 2003.
75. A.Yu.Kobitski, R.Scholz, I.D.Vragović, H.P.Wagner and D.R.T.Zahn:
TIME-RESOLVED PHOTOLUMINESCENCE STUDY OF EXCITONS
IN α -PTCDA AS A FUNCTION OF TEMPERATURE
Phys.Rev.B 68, 155201 [7 pages] (2003).
76. S.M.Vučenović, S.Pelemiš, B.Škipina, B.Markoski, D.Lj.Mirjanić i J.P.Šetrajčić:
EKSITONI U VIŠESLOJNIM MATERIJALIMA – SUPERREŠETKAMA
Zbornik radova 2. SavMat, 137-148 (2009).
77. J.P.Šetrajčić, D.I.Ilić, B.Markoski, A.J.Šetrajčić,
S.M.Vučenović, D.Lj.Mirjanić, B.Škipina and S.S.Pelemiš:
ADAPTING AND APPLICATION OF THE GREEN'S FUNCTIONS METHOD ONTO
RESEARCH OF THE MOLECULAR ULTRATHIN FILM OPTICAL PROPERTIES
Physica Scripta T 135, 014043: 1-4 (2009).
78. J.P.Šetrajčić, S.M.Vučenović, D.Lj.Mirjanić, S.S.Pelemiš and B.Škipina:
SELECTIVE ABSORPTION OF LIGHT IN MOLECULAR
CRYSTALLINE NANOFILMS AS A CONSEQUENCE ON QSE
3rd International Symposium on Molecular Materials (MolMat), Toulouse (France) 2008.
79. S.S.Pelemiš and J.P.Šetrajčić:
EXCITONS IN DOPPED MOLECULAR NANOFILMS
1st EMMPT, Jahorina (BiH) 2009.
80. J.P.Šetrajčić, S.M.Vučenović, D.Raković and D.Lj.Mirjanić:
EXCITON STATES OF THIN CRYSTALLINE FILMS
Tehnika – Novi materijali 13(1), 17-21 (2004).

81. J.P.Šetrajčić, S.S.Pelemiš, S.M.Vučenović, B.Škipina, D.Lj.Mirjanić i E.Jakupović:
DISKRETNA I SELEKTIVNA OPTIČKA APSORPCIJA
U MOLEKULSKIM NANOKRISTALNIM FILMOVIMA
Zbornik radova 52. ETRAN, MO4.1, 1-4 (2008).
82. S.S.Pelemiš, B.Škipina, J.P.Šetrajčić, B.Markoski i N.V.Delić:
INFRACRVENA REZONANTNA APSORPCIJA
KOD MOLEKULSKIH NANOFILMOVA
*1. Nacionalna konferencija: FOTONIKA
– teorija i eksperimenti u Srbiji, Vinča–Beograd 2009.*
83. Z.Ikonić i V.Milanović:
POLUPROVODNIČKE KVANTNE MIKROSTRUKTURE
Univerzitet u Beogradu, Beograd 1997.
84. A.I.Anselym:
VVDENIE V TEORIYU POLUPROVODNIKOV
Nauka, Moskva 1990.
85. J.P.Šetrajčić, S.M.Vučenović, B.S.Tošić and V.D.Sajfert:
EXCITON SPECTRA IN PERTURBED MOLECULAR FILMS
Proceedings 5th GCBPU, 635-638 (2003).
86. S.M.Vučenović, J.P.Šetrajčić, S.S.Pelemiš, B.S.Tošić, D.Lj.Mirjanić:
DIELECTRIC PROPERTIES OF MOLECULAR CRYSTALLINE FILMS
24th MIEL, Niš 2004.
87. S.M.Vučenović, J.P.Šetrajčić, D.Lj.Mirjanić, B.Škipina and S.S.Pelemiš:
OPTICAL PHENOMENA IN MOLECULAR CRYSTALLINE NANOSTRUCTURES
1st Physics Conference BiH, Teslić 2008.
88. S.S.Pelemiš, B.Škipina, S.M.Vučenović, D.Lj.Mirjanić and J.P.Šetrajčić:
SELECTIVE APSORPTION IN SIMETRIC MOLECULAR NANO-FILMS
IEEE – Proceedings 26th MIEL 1, 125-128 (2008).
89. S. S.Pelemiš and J.P.Šetrajčić:
EXCITONS IN DOPPED MOLECULAR NANOFILMS
Proceedings 1st EMMPI, 431-435 (2009).
90. S.S.Pelemiš, J.P.Šetrajčić, B.Markoski, N.V.Delić, S.M.Vučenović and D.Lj.Mirjanić:
IR RESONANT ABSORPTION IN MOLECULAR NANOFILMS
2nd International School and Conference on Photonics (Photonica), Belgrade 2009.
91. B.Markoski, J.P.Šetrajčić, S.Jaćimovski, S.Pelemiš:
ABSORPTION IN SYMMETRIC MOLECULAR NANOFILMS
J.Nanosci.Nanotech. – accepted (2009).
92. S.M.Vučenović, D.Lj.Mirjanić, B.Škipina, J.P.Šetrajčić, S.S.Pelemiš:
PROMJENE OPTIČKIH OSOBINA U NEMETALNIM NANO-FILMOVIMA
7. MNM, Zenica (2008).
93. J.P.Šetrajčić, S.S.Pelemiš, S.M.Vučenović, B.Škipina, D.Lj.Mirjanić i E.Jakupović:
DISKRETNA I SELEKTIVNA OPTIČKA APSORPCIJA
U MOLEKULSKIM NANOKRISTALNIM FILMOVIMA
52. ETRAN, Palić 2008.
94. S.Pelemiš, D. Lj. Mirjanić J.P.Šetrajčić, B. Markoski S.M. Vučenović, B. Škipina:
IC REZONANTNA APSORPCIJA U MOLEKULSKIM NANOFILMOVIMA
Zbornik radova 53. ETRAN, Vrnjačka Banja 2009.
95. J.P.Šetrajčić, S.M.Vučenović, B.Markoski, S.S.Pelemiš and D.Lj.Mirjanić:
RESONANT OPTICAL ABSORPTION IN MOLECULAR NANOFILMS
MIPRO'09, 32nd International Convention, Conference MEET, Opatija (Croatia) 2009.
96. M.Hoffman, K.Schmidt, T.Fritz, T.Hasche, V.M.Agranovich and K.Leo:
THE LOWEST ENERGY FRENKEL AND CHARGE-TRANSFER EXCITONS
IN QUASI-ONE-DIMENSIONAL STRUCTURES: APPLICATION TO
MEPTCDI AND PTCDA CRYSTALS
Chem.Phys. 258, 73 (2000).

97. I.Vragovic and R.Scholz:
FRENKEL EXCITON MODEL OF OPTICAL ABSORPTION
AND PHOTOLUMINESCENCE IN ALPHA-PTCDA
Phys.Rev.B **68**, 155202 (2003).
98. R.J.Holmes, S.Kena-Cohen, V.M.Menon and S.R.Forrest:
STRONG COUPLING AND HYBRIDIZATION OF FRENKEL AND WANNIER-MOTT
EXCITONS IN AN ORGANIC-INORGANIC OPTICAL MICROCAVITY
Phys.Rev.B **74**, 235211 (2006).
99. R.Schuster, M.Knupfer and H.Berger:
EXCITON BAND STRUCTURE OF PENTACENE MOLECULAR SOLIDS:
BREAKDOWN OF THE FRENKEL EXCITON MODEL
Phys.Rev.Lett. **98**, 037402 (2007).
100. S.R.Forrest:
ULTRATHIN ORGANIC FILMS GROWN BY ORGANIC MOLECULAR BEAM
DEPOSITION AND RELATED TECHNIQUES
Chem.Rev. **97**(6), 1793 (1997).
101. R.Friedlen, M.P.de Jong, S.L.Sorensen, W.Osikowicz,
S.Marciniak, G.Hwall, A.Lindgren and W.R.Salaneck:
RESONANT AUGER SPECTROSCOPY ON PERYLENE,
PORPHYRINE AND HEXABENZOCORONENE THIN FILMS
*2nd Workshop on Advanced Spectroscopy of Organic Materials
for Electronic Applications*, Kanagawa 2003.
102. C.Rger and F.Wrthner:
CORE-TETRASUBSTITUTED NAPHTHALENE DIIMIDES: SYNTHESIS,
OPTICAL PROPERTIES, AND REDOX CHARACTERISTICS
J.Org.Chem. **72**, 8070-8075 (2007).
103. T.Dienel, A.Krause, R.Forker and T.Fritz:
CHARGED MOLECULES ON INSULATORS:
OPTICAL SPECTROSCOPY OF PTCDA IONS,
E-Transactions 2008, Thin Films Division, DS 4: Organic Thin Films, Berlin 2008.
104. C.Hippius, I.H.M.van Stokkum, M.Gsa1nger, M.M.Groeneveld, R.M.Williams and F.Wrthner:
SEQUENTIAL FRET PROCESSES IN CALIX[4]ARENE-LINKED
ORANGE-RED-GREEN PERYLENE BISIMIDE DYE ZIGZAG ARRAYS
J.Phys.Chem.C **112**, 2476 (2008).
105. Z.G.Soos, M.H.Hennessy and G.Wen:
FRENKEL AND CHARGE TRANSFER STATES OF CONJUGATED
POLYMERS AND MOLECULES
Chem.Phys. **227**, 19 (1998).
106. M.H.Hennessy, Z.G.Soos, R.A.Pascal and A.Girlando:
VIBRONIC STRUCTURE OF PTCDA STACKS:
THE EXCITON-PHONON-CHARGE-TRANSFER DIMER
Chem.Phys. **245**, 199 (1999).
107. I.D.Vragovic, R.Scholz and J.P.Šetrajčić:
OPTICAL PROPERTIES OF PTCDA BULK CRYSTALS AND ULTRATHIN FILMS
Materials Science Forum **518**, 41-46 (2006).
108. M.I.Alonso, M.Garriga, N.Karl, J.O.Osso and F. Schreiber:
ANISOTROPIC OPTICAL PROPERTIES OF SINGLE CRYSTALLINE PTCDA
STUDIED BY SPECTROSCOPIC ELLIPSOMETRY
Organic Electronics **3**, 23 (2002).
109. M.Knupfer, T.Schwieger, J.Fink, K.Leo and M. Hoffmann:
EXCITONS IN QUASI-ONE-DIMENSIONAL ORGANIC CRYSTALS
Phys.Rev.B **66**, 035208 (2002).
110. F.Würthner, S.Ahmed, C.Thalacker and T.Debaerdemaeker:
CORE SUBSTITUTED NAPHTHALENE BISIMIDES: NEW FLUOROPHORS
WITH TUNABLE EMISSION WAVELENGTH FOR FRET STUDIES
Chem.Eur.J. **8**, 4742-4750 (2002).

111. C.Röger, S.Ahmed and F.Würthner:
SYNTHESIS AND OPTICAL PROPERTIES OF FLUORESCENT
CORE-TRISUBSTITUTED NAPHTHALENE DIIMIDE DYES
Synthesis, 1872-1876 (2007).
112. S.Pelemiš, B.Škipina, S.M.Vučenović, D.Lj.Mirjanić, J.P.Šetrajić:
APSORPCIJA KOD MOLEKULSKIH NANOFILMOVA
Tehnika – Novi materijali **17/2**, 13-19 (2008).
113. S.M.Vučenović, D.Lj.Mirjanić, B.Škipina, J.P.Šetrajić, S.S.Pelemiš:
PROMJENE OPTIČKIH OSOBINA U NEMETALNIM NANO-FILMOVIMA
*Zbornik radova 7. Naučno/stručni simpozijum Metalni i nemetalni
materijali (MNM) sa međunarodnim učešćem*, 387-392 (2008).
114. S.M.Vučenović, S.S.Pelemiš, B.Škipina, D.Lj.Mirjanić, J.P.Šetrajić:
APSORPCIONE KARAKTERISTIKE ULTRATANKIH NEMETALNIH FILM-STRUKTURA
Zbornik radova 7. MNM, 393-399 (2008).
115. D.Lj.Mirjanić, S.M.Vučenović, J.P.Šetrajić, N.V.Delić, S.Pelemiš, B.Škipina:
OPTIČKI SELEKTIVNO-APSORPCIONI MOLEKULSKI NANOSLOJNI MATERIJALI
Zbornik radova Naučnog skupa Savremeni materijali (SavMat), 83 - 96 (2008).
116. J.P.Šetrajić, S.M.Vučenović, B.Markoski, S.Pelemiš, D.Lj.Mirjanić:
RESONANT OPTICAL ABSORPTION IN MOLECULAR NANOFILMS
32nd International Convention MIPRO 2009, May 25-29, 2009, Vol 1, 52-57. Opatija, Croatia.
117. S.S.Pelemiš, J.P.Šetrajić, B.Markoski, N.V.Delić and S.M.Vučenović:
SELECTIVE ABSORPTION IN TWO LAYERED OPTIC FILMS
J.Comput.Theor.Nanosci. **6(7)**, 1474-1477 (2009).
118. S.S.Pelemiš, J.P.Šetrajić, B.Markoski, N.V.Delić, S.M.Vučenović and D.Lj.Mirjanić:
IR RESONANT ABSORPTION IN MOLECULAR NANOFILMS
Acta Phys.Pol.A **116(4)**, 579-584 (2009).
119. S.S.Pelemiš, B.Škipina, S.M.Vučenović, D.Lj.Mirjanić, J.P.Šetrajić:
SELECTIVE APSORPTION IN SIMETRIC MOLECULAR NANO-FILMS
26th MIEL, Niš 2008.
120. S.M.Vučenović, S.S.Pelemiš, B.Škipina, D.Lj.Mirjanić, J.P.Šetrajić:
APSORPCIONE KARAKTERISTIKE ULTRATANKIH NEMETALNIH FILM-STRUKTURA
7. MNM, Zenica (2008).
121. D.Lj.Mirjanić, S.M.Vučenović, J.P.Šetrajić, N.V.Delić, S.Pelemiš, B.Škipina:
OPTIČKI SELEKTIVNO-APSORPCIONI MOLEKULSKI NANOSLOJNI MATERIJALI
SavMat, Banja Luka 2008.
122. B.Škipina, S.M.Vučenović, S.S.Pelemiš, J.P.Šetrajić and D.Lj.Mirjanić:
DISCRETE ABSORPTION IN MOLECULAR NANOFILMS,
11th International Symposium on Physics of Materials (ISPMA), Prague (Czech) 2008.
123. S.Pelemiš, B.Škipina, B.Markoski, S.M.Vučenović, D.Lj.Mirjanić, J.P.Šetrajić:
APSORPCIJA KOD RAZLIČITIH MOLEKULSKIH NANOFILMOVA,
7. KMI, Beograd 2008.
124. S.M.Vučenović, J.P.Šetrajić, B.Markoski, D.Lj.Mirjanić, S.S.Pelemiš, B.Škipina:
CHANGES IN OPTICAL PROPERTIES OF MOLECULAR NANOSTRUSTURES,
YUCOMAT 2009, Herceg Novi, Montenegro.
125. B.Škipina, D.Lj.Mirjanić, S.M.Vučenović, S.Pelemiš, J.P.Šetrajić and B.Markoski:
SELECTIVE IC ABSORPTION IN MOLECULAR NANOFILMS
2nd ICOM, Herceg Novi (Montenegro) 2009.
126. D.Lj.Mirjanić, B.Škipina, S.Pelemiš, J.P.Šetrajić and S.M.Vučenović:
DISCRETE ABSORPTION IN CRYSTALLINE NANOFILMS
International Conference HighMatTech, Kiev (Ukraine) 2009.

KRATKA BIOGRAFIJA

MR SVETLANA S. PELEMIŠ



Mr Svetlana Pelemiš je rođena 16.06.1974. u Tuzli (BiH).

Osnovnu i srednju školu završila u rodnom gradu.

Studije iz fizike upisala 1992. godine, a diplomirala na Institutu za fiziku Prirodno-matematičkog fakulteta u Novom Sadu 2000. godine.

Poslediplomske studije iz Medicinske fizike na ACIMSI Univerziteta u Novom Sadu upisala 2000. godine, a 2006. je tamo odbranila svoju magistarsku tezu.

U redovnom radnom odnosu je na Tehnološkom fakultetu u Zvorniku, Univerzitet u Istočnom Sarajevu, Republika Srpska od 2000. godine, u zvanju višeg asistenta za predmet Tehnička fizika.

Svoja naučna istraživanja iz oblasti nelinearnih optičkih kvantnih fenomena u nanostrukturnim dielektričnim materijalima sprovodi u saradnji sa novosadskim kolegama. U svojstvu saradnika-istraživača učestvuje na dva naučna projekta koje finansijski potpomaže Ministarstvo za nauku Republike Srpske.

Kao autor i koautor do sada je objavila 25 radova u časopisima i zbornicima (od čega je 15 međunarodnog značaja), a svoje istraživačke rezultate saopštila je na 28 naučnih skupova (od čega je 15 međunarodnog značaja).

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:
Doktorska disertacija
VR
- Autor:
Svetlana Pelemiš
AU
- Mentor:
Dr Jovan Šetrajčić,
redovni profesor, PMF, Novi Sad
MN
- Naslov rada:
Optičke osobine
nanokristalnih dielektričnih
film-struktura
NR
- Jezik publikacije:
Srpski (latinica)
JP
- Jezik izvoda:
Srpski
JI
- Zemlja publikovanja:
Srbija
ZP
- Uže geografsko područje:
Vojvodina
UGP
- Godina:
2010.
GO
- Izdavač:
Autorski reprint
IZ
- Mesto i adresa:
Prirodno-matematički fakultet,
Trg Dositeja Obradovića 4, 21000 Novi Sad
MA
- Fizički opis rada:
(6/112/126/12/67/1043/1)
FO
- Naučna oblast:
Fizika
NO
- Naučna disciplina:
Fizika čvrstog stanja
ND
- Predmetna odrednica / ključne reči:
ultratanki molekularni filmovi, eksitoni, Grinove
funkcije, spektri, permitivnost, indeks apsorpcije
PO
- Čuva se:
Biblioteka Instituta za fiziku,
PMF Novi Sad
- Izvod:
U radu je primenjen metod dvovremen-
skih Grinovih funkcija za ispitivanje uticaja
granica film-struktura sa primitivnom kristal-
nom rešetkom na energetski spektar i moguća
stanja eksitona i na određivanje permitivnosti
te apsorpcionih svojstava tih struktura. Dobi-
jeni rezultati predstavljeni su grafički i izvršene
su analize, odnosno poredjenja tih rezultata sa
odgovarajućim u idealnim beskonačnim (pros-
torno neograničenim) strukturama. Na osnovu
toga uočene su najbitnije razlike između njih i
objašnjeni efekti dimenzionog kvantovanja, kao
i eksperimentalno utvrđene činjenice.
IZ
- Datum prihvatanja teme od strane Veća:
.04.2009.
DP
- Datum odbrane:
.2010.
DO
- Članovi komisije:
- Predsednik:
Dr Milica Pavkov-Hrvojević,
vanredni profesor, PMF, Novi Sad
- Članovi:
Dr Milan Pantić,
vanredni profesor PMF, Novi Sad
Dr Olivera Klisurić,
docent, PMF, Novi Sad
Dr Branko Markoski,
docent, Tehnički fakultet „M. Pupin”, Zren-
janin
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:
Ph Disertation
CC
- Author:
Svetlana Pelemiš
AU
- Mentor:
Prof. Dr. Jovan Šetrajić
MN
- Title:
*Optical Properties of
Nanocrystalline Dielectric Film-Structures*
NR
- Language of text:
Serbian
LT
- Language of abstract:
English
LA
- Country of publication:
Serbia
CP
- Locality of publication:
Vojvodina
LP
- Publication year:
2010.
PY
- Publisher:
Author's reprint
PU
- Publ.place:
*Novi Sad,
Department of Physics,
Faculty of Sciences,
Trg Dositeja Obradovića 4*
PP
- Physical description:
(6/112/126/12/67/1043/1)
FO
- Scientific field:
Physics
SF
- Scientific discipline:
Solid State Physics
SD
- Key words:
*ultrathin molecular films, excitons, Green's
functions, spectra, permittivity, absorption in-
dex*
KW
- Holding data:
*Library
Department of Physics, Novi Sad*
- HD Note: N
- Abstract:
*In this work, the method of the two-time de-
pendent Green's functions was applied to re-
searching of the influence of the surfaces of
the film-structures with simple crystalline lat-
tice on the energy spectra and possible exci-
ton states as well as permittivity determined of
these structures. The obtained results are plot-
ted and the analyzes are carried out, together
with the comparison of those results to those
obtained for the corresponding ideal, infinite,
e.i. spatially unbounded structures. Based on
these analyzes, beside observed experimental
facts, the most important differences have been
observed and the effects of dimensional quan-
tifying have been explained.*
AB
- Accepted by the Scientific Board on:
05.05.2005.
ASB
- Defended:
26.09.2005.
DE
- Work defend board:
 - DB President:
*Dr. Milica Pavkov-Hrvojević,
Associated Professor, Faculty of Sciences,
University of Novi Sad*
 - Member:
*Dr Milan Pantić,
Associated Professor, Faculty of Sciences,
University of Novi Sad
Dr Olivera Klisurić,
Docent, Faculty of Sciences,
University of Novi Sad
Dr Branko Markoski,
Docent, Technical Faculty
„M.Pupin”, Zrenjanin*