

Igor J. Šetrajčić<sup>1\*</sup>, Dragana Rodić<sup>1</sup>, Jovan P. Šetrajčić<sup>1</sup>, Siniša M. Vučenović<sup>2</sup>, Ana J. Šetrajčić–Tomić<sup>3</sup>, Matilda Vojnović<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Univerzitet u Novom Sadu, Prirodno-matematički fakultet, Departman za fiziku, Novi Sad, Vojvodina, Srbija, <sup>2</sup>Univerzitet u Banjoj Luci, Prirodno-matematički fakultet, Banja Luka, Republika Srpska, BiH, <sup>3</sup>Univerzitet u Novom Sadu, Medicinski fakultet, Novi Sad, Vojvodina, Srbija

Naučni rad

ISSN 0351-9465, E-ISSN 2466-2585

UDC:667.637.4:628.9.03(n)

doi: 10.5937/ZasMat1703377S



Zastita Materijala 58 (3)  
377 - 384 (2017)

## Optičke posebnosti različitih molekulskih kristalnih nanofilmova

### IZVOD

Primenom ranije formiranog modela molekulskih nanofilm kristalnih struktura u ovom radu teorijski su istražene i izučene promene optičkih osobina usled prisustva različitih granica ultratankih uzoraka. Pomoću nađenog zakona disperzije eksitona i teorije odziva sistema na spoljašnju perturbaciju, određena je relativna dinamička permitivnost kao i optičke osobine (refraktancija, apsorpcija, reflektancija i transparentcija) ovih ultratankih dielektričnih filmova. Rezultati su pokazali da granični parametri diktiraju izmenu prelamanja, pojavu diskretne transparentcije i apsorpcije, kao i da menjaju položaj i broj apsorpcionih pikova.

**Ključne reči:** tanki film, eksitoni, Grinove funkcije, permitivnost, prelamanje, apsorpcija, transparentcija.

### 1. UVOD

Zbog dobijanja fundamentalnih informacija o ekstremno drugačijim fizičko-hemijskim osobinama materijala, teorijska istraživanja niskodimenzionih kristalnih sistema (nanostruktura: ultratankih filmova, kvantnih žica i tački i sl.) veoma su intenzivirana. Potencijalno široka praktična (tehničko-tehnološka) primena u nano, opto i bio-elektronici [1] daje ovim istraživanjima poseban značaj. 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 sve ove pozitivne osobine. Posebnost ovih struktura ogleda se u tome što prisustvo bliskih graničnih površi dovodi do veoma izmenjenih opšte poznatih svojstava ovih materijala i pojave nespecifičnih fenomena (kao posledica efekata dimenzionog kvantovanja [2], te oblika i spoljašnjih/graničnih uslova („konfajment“-efekata) – nastalih usled značajnog uticaja izmenjenih graničnih uslova) u poređenju sa istim karakteristikama odgovarajućih balkovskih uzoraka [3].

\*Autor za korespondenciju: Igor J. Šetrajčić

E-mail: igor.setrajcic@df.uns.ac.rs

Rad primljen: 05. 06. 2017.

Rad prihvaćen: 16. 07. 2017.

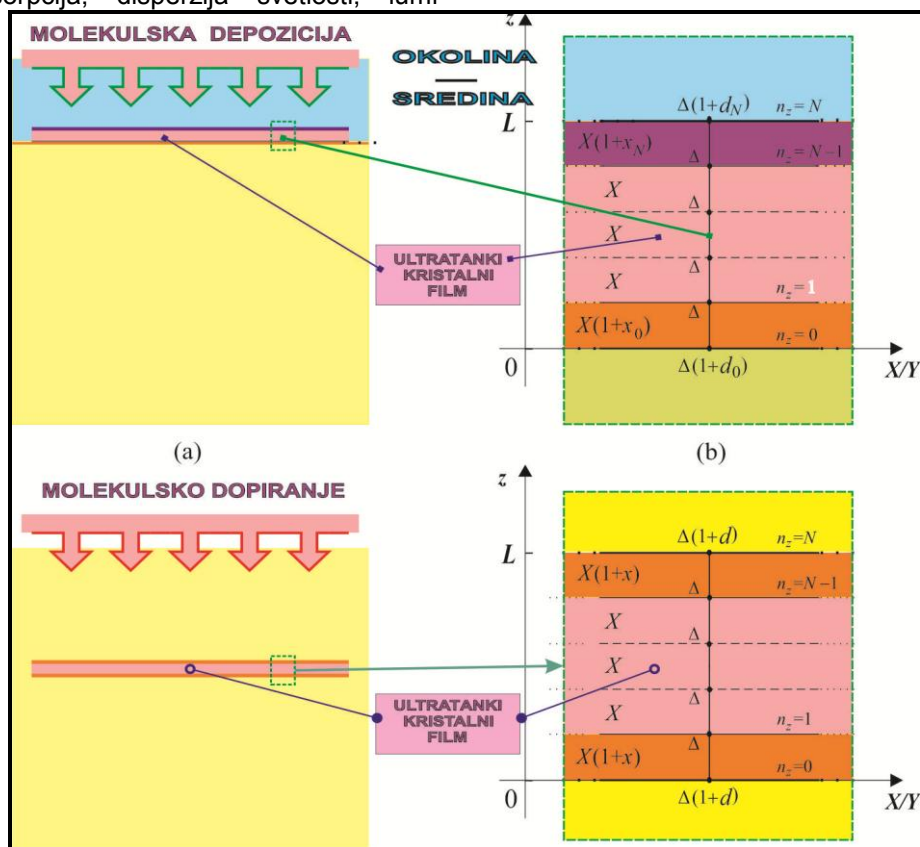
Rad je dostupan na sajtu: www.idk.org.rs/casopis

Nanomedicina, kao oblast sa najvećom perspektivom primene nanoskopskih rezultata, definiše se kao popravka, izgradnja, monitoring i kontrola humanih bioloških sistema na molekulskom nivou korišćenjem nanostrukture i nanouređaja. Ona predstavlja primenu nanotehnologija na poljima medicine, farmacije i tehnologije. Ova grana nauke ostvaruje mogućnost posmatranja i dijagnosticiranja, lečenja, konstrukciju i kontrolu bioloških sistema čoveka na ćelijskom nivou koristeći čestice i materijale nanodimenzija [4]. Glavni adut nanomedicine se bazira na prodiranju nanočestica u same ćelije i lečenje bolesti u samom korenu, odakle je i počela – u ćeliji [5]. Još jedna od bitnih karakteristika nanočestica je da one imaju mnogo veću površinu u odnosu na zapreminu (što je manji poluprečnik čestica to je veća površina iste mase materijala). Ovo svojstvo nanočestica daje mogućnost velike apsorpcije [6].

Jedan veći deo naših istraživanja posvetili smo analiziranju specifičnosti u optičkim osobinama molekulskih kristala tipa anracena, pentacena i njima sličnih. Ukoliko su uzorci velikih dimenzija „balkstrukture“, sa ukupnim brojem atoma:  $N = N_x N_y N_z \gg 10^3$ , tj.  $N_i \gg 10$ ,  $i = x, y, z$ , oni su totalni apsorberi elektromagnetnog zračenja iz bliske infracrvene oblasti, ali kada su nanoskopskih dimenzija (sa  $N_i < 10$ ), nastupaju iznenađujuće optičke osobine. U radu smo posmatrali simetrične i nesimetrične ultratanke dielektrične kristalne filmove (čija samo debljina ne prelazi desetak međuatomskih ravni, a u ostalim pravcima su praktično neograničeni), koji se dobijaju metodama molekulske depozicije na

matričnoj podlozi (supstratu) ili dopiranjem matrice stranim atomima [7], kao na slici 1). Tipični predstavnici ovako dobijenih film-struktura su molekulski kristali, kod kojih se javljaju elementarna pobuđenja – eksitoni, u rezultatu interakcije spoljašnjeg promenljivog elektromagnetnog polja i elektrona kristala. Eksitonski koncept definiše dielektrična, optička (apsorpcija, disperzija svetlosti, lumi-

nescencija), fotoelektrična i slična svojstva kristala, te se upravo zbog toga javio interes za izučavanjem eksitonskog podsistema u nanoskopskim strukturama [8]. Pomoću eksitonskog zakona disperzije i njihove gustine stanja, teorijski se definiše relativna permitivnost, a preko nje i optičke osobine posmatranog sistema.



Slika 1. Nastanak nesimetrično (a) i simetrično (b) perturbovanog modela ultratankog dielektričnog filma  
Figure 1. The occurrence of non-symmetrically (a) and symmetrically (b) perturbed ultra-thin dielectric film model

## 2. MODEL EKSITONSKOG ULTRATANKOG FILMA

Standardni izraz za efektivni eksitonski hamiltonijan u harmonijskoj aproksimaciji i bozonskoj reprezentaciji [9–11] ima oblik:

$$H = \sum_{\vec{n}} \Delta_{\vec{n}} B_{\vec{n}}^{\dagger} B_{\vec{n}} + \sum_{\vec{n}, \vec{m}} X_{\vec{n}\vec{m}} B_{\vec{n}}^{\dagger} B_{\vec{m}}, \quad (1)$$

gde su  $B_{\vec{n}}^{\dagger}$  i  $B_{\vec{n}}$  kreacioni i anihilacioni operatori eksitona na čvoru  $\vec{n}$  kristalne rešetke,  $\Delta_{\vec{n}}$  predstavlja energiju izolovanog eksitona na tom čvoru, a  $X_{\vec{n}\vec{m}}$  su matrični elementi eksitonskog transfera sa čvora  $\vec{n}$  na čvor  $\vec{m}$ . U modelu se uzima da je energija eksitona na čvoru  $\sim 10^2$  puta veća od energije njegovog transfera.

Mikroteorijsku analizu sprovedemo metodom Grinovih funkcija [9] i u tu svrhu posmatramo Grinovu funkciju:  $G_{\vec{n}\vec{m}}(t) = \langle \langle B_{\vec{n}}(t) B_{\vec{m}}^{\dagger}(0) \rangle \rangle$ , koja zadovoljava jednačinu kretanja:

$$i\hbar \frac{d}{dt} G_{\vec{n}\vec{m}}(t) = i\hbar \delta(t) \delta_{\vec{n}\vec{m}} + \Delta_{\vec{n}} G_{\vec{n}\vec{m}}(t) + \sum_{\vec{l}} X_{\vec{n}\vec{l}} G_{\vec{l}\vec{m}}(t) \quad (2)$$

Dimenzije posmatranog kristalnog nano-filma su takve da je on neograničen u svim XY ravnima, dok u z-pravcu ima konačnu (nano) debljinu  $L=N \cdot a$ , gde je  $N$  prirodan jedocifren broj, a  $a$  – konstanta proste kubne rešetke (slika 1). Zbog postojanja graničnih površi energije eksitona na čvorovima i transferi energije između graničnih ( $n_z=0$ ;  $n_z=N$ ) i njima susednih ravni ( $n_z=1$ ;  $n_z=N-1$ ) bivaju perturbovani, što možemo prikazati na sledeći način [12,13]:

$$\begin{aligned}\Delta_{\bar{n}} &\equiv \Delta \left(1 + d_0 \delta_{n_z,0} + d_N \delta_{n_z,N}\right); \\ X_{\bar{n},\bar{n}+\bar{\lambda}} &\equiv X \left(1 + x_0 \delta_{n_z,0} + x_N \delta_{n_z,N-1}\right); \\ X_{\bar{n},\bar{n}-\bar{\lambda}} &\equiv X \left(1 + x_0 \delta_{n_z,1} + x_N \delta_{n_z,N}\right),\end{aligned}$$

gde parametar  $d$  definiše perturbaciju na čvoru graničnih površi, a parameter  $x$  perturbaciju transfere u graničnim slojevima duž z-pravca.

Uzimajući u obzir navedene granične uslove i izraze za hamiltonijan (1) i jednačinu kretanja (2), dolazimo do jednačine za tražene Grinove funkcije [9–11]. Nakon potpune vremenske, ali sada i samo delimične prostorne Furije-transformacije ovih jednačina, dobijamo:

$$\begin{aligned}G_{n_z, m_z} &\left[ \rho - \frac{\Delta}{|X|} (d_0 \delta_{n_z,0} + d_N \delta_{n_z,N}) \right] + \\ &+ G_{n_z+1, m_z} (1 + x_0 \delta_{n_z,0} + x_N \delta_{n_z,N-1}) + \\ &+ G_{n_z-1, m_z} (1 + x_0 \delta_{n_z,1} + x_N \delta_{n_z,N}) = \frac{i\hbar}{2\pi |X|} \delta_{n_z, m_z},\end{aligned}\quad (3)$$

gde je označeno:

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

Jednačina (3) predstavlja sistem od  $N + 1$  nehomogenih algebarsko-diferencnih jednačina za nepoznate Grinove funkcije  $G_{n_z} \equiv G_{n_z, m_z}(\omega)$ . Kako su nam za nalaženje zakona disperzije potrebni samo polovi ovih funkcija, dovoljno je naći determinantu sistema (3) i istu izjednačiti sa nulom [9]. Na ovaj način dobijamo  $N + 1$  rešenje:  $\rho \equiv \rho_v$ ,  $v = 1, 2, \dots, N+1$ , i tražene Grinove funkcije u obliku:

$$G_{n_z} = -\frac{i\hbar}{2\pi |X|} \sum_{v=1}^{N+1} \frac{g_{n_z}(\rho_v)}{\rho - \rho_v},\quad (4)$$

sa spektralnim težinama:

$$g_{n_z}(\rho_v) \equiv \frac{B_{n_z}(\rho_v) B_{N-n_z}(\rho_v)}{\left. \frac{d}{d\rho} D_{N+1}(\rho) \right|_{\rho=\rho_v}}$$

koje definišu verovatnoće nalaženja, tj. prostornu raspodelu eksitonskih stanja  $\rho_v$ .

## 2. DIELEKTRIČNE I OPTIČKE KARAKTERISTIKE FILMA

Prema definiciji, permitivnost predstavlja zavisnost relativne dinamičke permitivnosti od frekvencije inicijalnog elektromagnetnog pobuđenja (frekventna disperzija dielektrične propustljivosti), tj. dielektrični odziv posmatranog simetričnog mole-

kulskog filma na spoljašnje promenljivo elektromagnetno polje [11–14]. Na taj način, permitivnost  $\varepsilon(\omega)$  podrazumeva njenu zavisnost od frekvencije  $\omega$  spoljašnjeg polja. Teorija linearnog odziva [10,15] na spoljašnju perturbaciju definiše dinamičku permitivnost kao kompleksnu veličinu:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon'(\omega) + i\varepsilon''(\omega)\quad (5)$$

gde je  $\varepsilon'$  njen realni, a  $\varepsilon''$  imaginarni deo.

Nadalje, Maksvel je pokazao [16] da je dielektrična konstanta sredine jednaka kvadratu indeksa prelamanja:  $\varepsilon = \eta^2$ . Ako se uvede kompleksni indeks prelamanja:

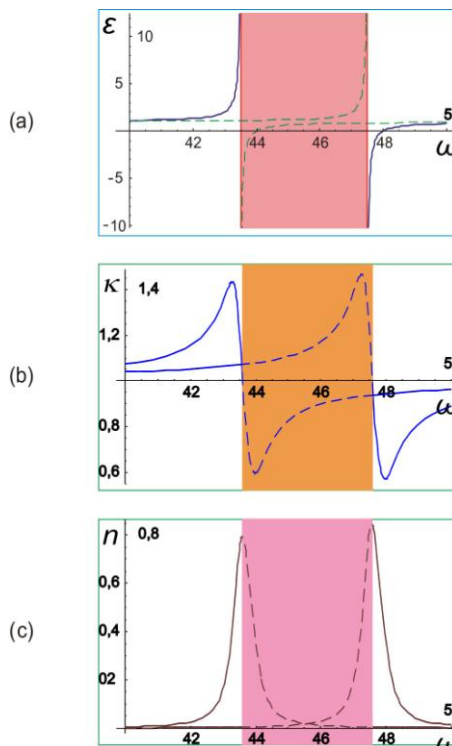
$$\eta = n + i\kappa,\quad (6)$$

slediće:

$$\varepsilon'(\omega) = n^2 - \kappa^2; \quad \varepsilon''(\omega) = 2n\kappa.\quad (7)$$

Na osnovu toga, možemo naći izraz za indeks prelamanja i indeks apsorpcije u sledećoj formi:

$$\begin{aligned}n(\omega) &= \sqrt{\frac{\varepsilon'}{2} \left[ \sqrt{1 + \left(\frac{\varepsilon''}{\varepsilon'}\right)^2} + 1 \right]} \\ \kappa(\omega) &= \sqrt{\frac{\varepsilon'}{2} \left[ \sqrt{1 + \left(\frac{\varepsilon''}{\varepsilon'}\right)^2} - 1 \right]}\end{aligned}\quad (8)$$



Slika 2. Permitivnost i indeksi prelamanja i apsorpcije balk-kristala

Figure 2. Permittivity and indices of refraction and absorption of the bulk-crystals

Ovo su izrazi za dinamičke indekse apsorpcije i prelamanja balkovskih kristalnih struktura (jer i  $\varepsilon'$  i  $\varepsilon''$  zavise od  $\omega$ ), a na slici 2. prikazane su te njihove frekventne zavisnosti.

Poznato je da su molekulske kristalne strukture tipa antracena apsolutni apsorberi elektromagnetnog zračenja u jednom intervalu bliskog infracrvenog dela spektra. To znači da oni, u tom intervalu niti reflektuju, niti propuštaju zračenje, odnosno, njihovi indeksi apsorpcije i transparentije su jednaki nuli:

$$r(\omega) = 0; \quad \tau(\omega) = 0.$$

Mora se ovde naglasiti da je ovakvo ponašanje optičkih osobina posmatranih neograničenih kristalnih struktura jednako u bilo kom delu tog uzorka, tj. da poseduju prostornu izotropiju.

$$\varepsilon_{n_z}(\omega) = \left\{ 1 - \frac{2\hbar F}{|X|} \sum_{v=1}^{N+1} g_{n_z}^v \frac{\rho_v - \frac{\Delta}{|X|} - 2(\cos ak_x + \cos ak_y)}{\left(\frac{\hbar\omega}{|X|}\right)^2 - \left[\rho_v - \frac{\Delta}{|X|} - 2(\cos ak_x + \cos ak_y)\right]^2} \right\}^{-1} \quad (9)$$

gde je:  $F$  – strukturni faktor [13–15]. Kako permitivnost kod filma zavisi od prostornog položaja kristallografske ravni (duž z-ose), tj. od  $n_z = 0, 1, 2, \dots, N$ , to će i odgovarajući optički indeksi za film-strukture biti:

$$n_{n_z}(\omega) = \sqrt{\frac{\varepsilon'_{n_z}}{2} \left[ \sqrt{1 + \left(\frac{\varepsilon''_{n_z}}{\varepsilon'_{n_z}}\right)^2} + 1 \right]}; \quad \kappa_{n_z}(\omega) = \sqrt{\frac{\varepsilon'_{n_z}}{2} \left[ \sqrt{1 + \left(\frac{\varepsilon''_{n_z}}{\varepsilon'_{n_z}}\right)^2} - 1 \right]}. \quad (10)$$

Ukoliko se prihvati da je upadni ugao svetlosti veoma mali, kao i kod balk-struktura, može se pretpostaviti da će udeo reflektovane svetlosti od gornje površi filma biti zanemarivo mali. Međutim, na osnovu zadovoljenja osnovnog principa održanje energije (ili Kirhofovih zakonitosti elektromagnetnog fluksa), udeo svetlosti koji prolazi kroz kristalni film neće biti zanemariv i može se odrediti iz Kirhofove relacije:  $r + \kappa + \tau = 1$ , tj.

$$r_{n_z}(\omega) = 0; \quad \tau_{n_z}(\omega) = 1 - \kappa_{n_z}(\omega). \quad (11)$$

Ove zavisnosti bile su predmet izučavanja u prethodnim našim istraživanjima [16–20]. U najnovijim istraživanjima pokazali smo kako se mogu odrediti optičke osobine ali za ukupni film (u pravcu normalnom na granične površi, dakle duž z-ose), jer se merenjima mogu dobiti samo takvi podaci filma. Ovi izrazi glase:

$$n_F(\omega) = N \left[ \sum_{n_z} n_{n_z}^{-1}(\omega) \right]^{-1}; \quad \kappa_F(\omega) = \sum_{n_z} \kappa_{n_z}(\omega)$$

$$r_F(\omega) = 0; \quad \tau_F(\omega) = 1 - \kappa_F(\omega). \quad (12)$$

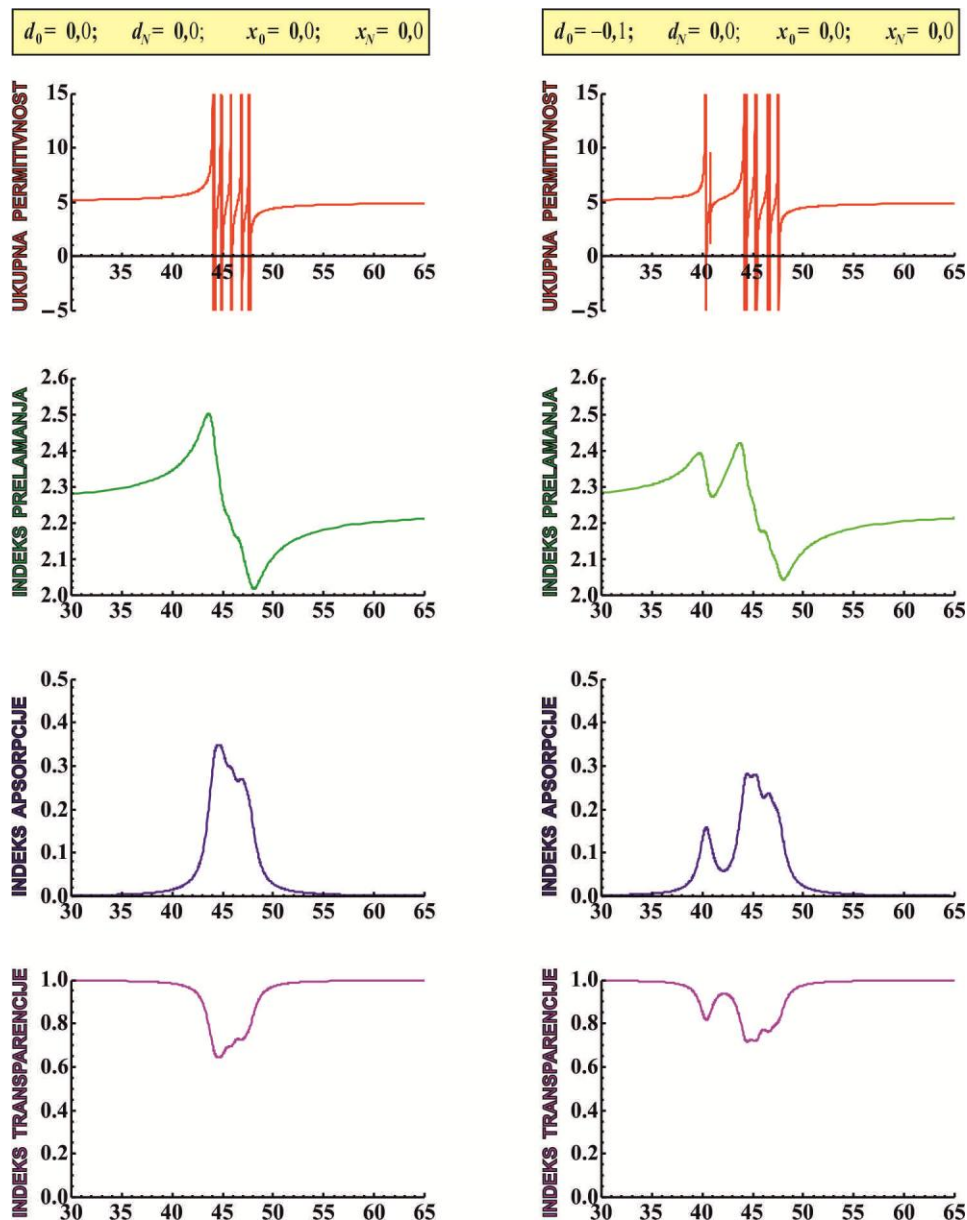
U prethodnim našim radovima [16–20], korišćenjem iste metode i istog modela, analizirali smo moguće posledice postojanja jedne nanoskopski male dimenzije uzorka (kristalni film), kao i uticaja postojanja dve granične površi sa različitim svojstvenim strukturnim i energetskim parametrima eksitonskog sistema u film-strukturama u poređenje sa, praktično neograničenim (balk) uzorcima iste hemijske i kristallografske strukture. Kao rezultat ove analize dobili smo eksitonski zakon disperzije, verovatnoće pojave i prostornu raspodelu eksitonskih stanja u filmu, te dinamičku permitivnost filma [9–11]. Tamo smo pokazali da se, na osnovu rešavanja sistema od  $N + 1$  nehomogenih diferencnih jednačina, može definisati zavisnost relativne dinamičke permitivnosti od frekvencije inicijalnog pobuđenja, tj. dielektrični odziv posmatranog ultratankog molekulskog filma na spoljašnje elektromagnetno polje, u sledećem obliku:

Na slikama 3, 4 i 5 prikazane su zavisnosti relativne dinamičke permitivnosti, indeksa prelamanja, indeksa apsorpcije i indeksa transparentije od redukovane energije, tj. frekvencije spoljašnjeg elektromagnetnog zračenja za četvoroslojni kristalni film. Na svim slikama su prikazane ove zavisnosti samo za celi film i to za neke tipične grupe grafika – za različite vrednosti perturbacionih parametara  $d$  i  $x$ . Perturbacioni parametar  $d$  se odnosi na izmenu energije eksitona  $\Delta_{\bar{n}}$ , dok perturbacioni parametar  $x$  menja eksitonske transfere energija među čvorovima  $X_{\bar{n}\bar{m}}$

Na vrhu svih grafika na slikama 3 – 5 naznačene su vrednosti perturbacionih parametara  $d_{0,N}$  i  $x_{0,N}$ , gdje se indeks „0“ odnosi na perturbacije prvog sloja atoma koji grade film i nalaze se obično na nekoj podlozi (substratu), dok se indeks „N“ odnosi na zadnji sloj atoma koji grade film i koji je obično izložen spoljašnjoj atmosferi. Prva kolona grafika na slici 3 se odnosi na neperturbovan (idealno) film, koji je samo „izrezan“ iz balka, ali na takav način da je sredina ispod i iznad filma sačinjena od iste vrste materijala kao i film, pa samim tim nema perturbacija energija eksitona (koje u ostalim

realnim uslovima uvek postoje, jer se iznad i ispod filma nalaze različite sredine). Iako idealan film ne postoji u realnim uslovima, on je ovde prikazan sa namerom da se njegovi grafici porede sa realnim

slučajevima i uoči uticaj postojanja različitih graničnih perturbacionih uslova. Grafici na desnoj strani odnose na 10% film sa perturbacije na energije eksitona, na prvom (donjem) sloju filma.



Slika 3. Grafici frekventne zavisnosti permitivnosti, indeksa apsorpcije, prelamanja i transparentije neperturbovanog i slabo perturbovanog ultratankog filma

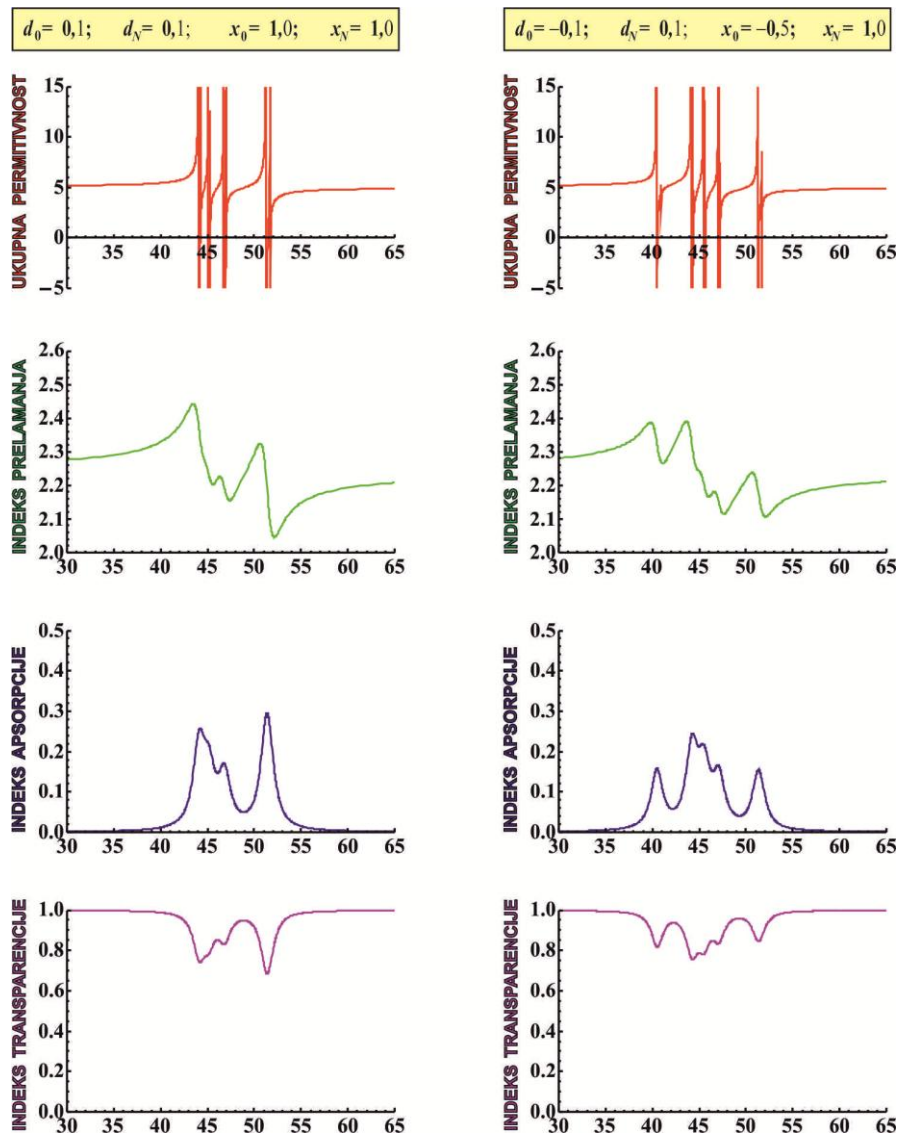
Figure 3. The graphs of frequency dependence of the permittivity and the indices of absorption, refraction and transparency for nonperturbed and weakly perturbed ultrathin film

Umesto rezonantnih linija kod permitivnosti, na svim graficima optičkih indeksa uočljiva je pojava rezonantnih pikova, čiji broj i raspored veoma zavisi od graničnih perturbacionih parametara. Broj pikova u neperturbovanom filmu jednak je broju slojeva filma, tj. pojavljuje se pet pikova.

Oblast spoljašnjeg elektromagnetnog zračenja, na koje film struktura daje svoj odziv u vidu kreiranja eksitona, pripada IC spektru, kao što je slučaj i

kod balka. Međutim, kod filma se uočava izostanak kontinuuma i pojava selektivne apsorpcije. Ovaj rezultat daje mogućnost optičkog inženjeringa, tj. mogućnosti da se izborom perturbacionih parametara filma kreiraju željene optičke osobine celokupnog filma. Ovo se svodi na diktiranje izmenjenih graničnih uslova u procesu fabrikovanja tankih filmova uz pomoć neke od postojećih tehnologija izrade nanostrukura (CVD, PVD...).





Slika 4. Grafici frekventne zavisnosti permitivnosti, indeksa apsorpcije, prelamanja i transparentije jače perturbovanog ultratankog filma

Figure 4. The graphs of frequency dependence of the permittivity and the indices of absorption, refraction and transparency for stronger perturbed ultrathin film

Broj rezonantnih pikova ostaje jednak u svim slučajevima gde je prisutna perturbacija, ali se uočava odvajanje pojedinih pikova u zavisnosti od perturbacije. Na slikama 3 i 4 se uočava odvajanje ka nižim frekvencijama jednog apsorpcionog pika na grafiku zavisnosti indeksa apsorpcije i to kada deluje 10% vrednost perturbacije na energije eksitona ( $d_{0/N} = \pm 0,1$ ). Na slici 4 je ovo odvajanje neznatno izraženije usled uticaja promene (perturbacije) vrednosti transfer-energije eksitona. Najveći efekat razdvajanja apsorpcionih pikova je kada su uključeni svi perturbacioni parametri, kao i pojava dva oštra pika, što je prikazano na slici 5.

### 3. ZAKLJUČAK

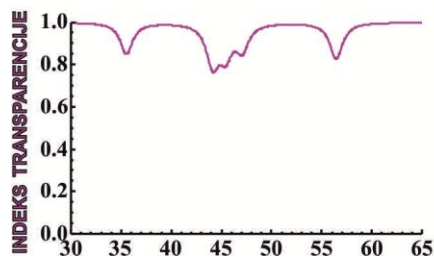
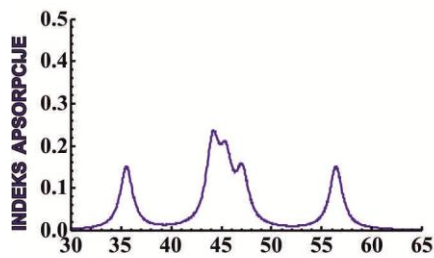
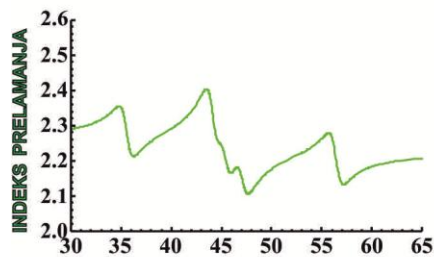
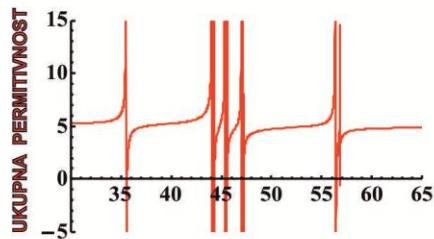
U ovom radu su prikazani rezultati modelovanja optičkih karakteristika dielektričnih molekulskih kri-

stala sačinjenih u obliku ultra-tankog filma. Izračunate su permitivnost i koeficijenti refrakcije, apsorpcije i transparentije. Film različito interaguje sa okolnim sredinama (tj. na gornjoj i donjoj površi filma), što je uračunato kroz dejstvo perturbacionih parametara. Za razliku od balka koji apsorbuje određenu zonu kontinualnog spektra spoljašnjeg elektromagnetnog zračenja, film ima rezonantni odziv i apsorbovaće samo uske, gotovo diskretne frekvencije. Broj apsorbovanih frekvencija jednak je broju atomskih paralelnih slojeva unutar filma.

Bitne razlike u dielektričnom odzivu (makroskopske, ali dimenziono-kvantne osobine) eksitona između balk i perturbovanih film-struktura kao isključivu posledicu ograničenosti filma duž z-pravca i postojanja perturbacija parametara na graničnim

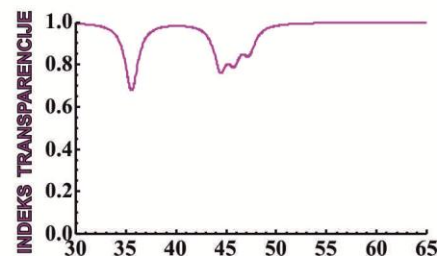
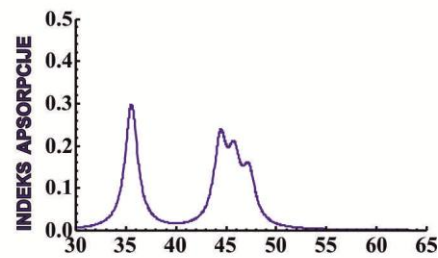
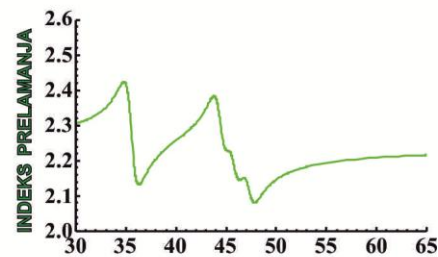
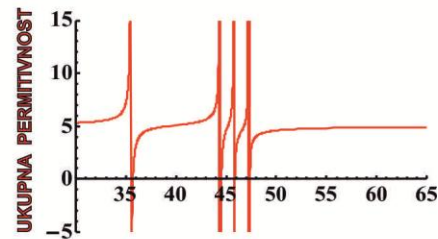
površima i graničnim slojevima strukture su rezultati ovih istraživanja. Dielektrična (permitivnost) i optička svojstva (apsorpcija, prelamanje, refleksija i transparenacija) filma pokazuju osobinu selektivno-

$$d_0 = 0,2; \quad d_N = -0,2; \quad x_0 = 2,0; \quad x_N = -0,9$$



sti, tj. pojavu diskretnih rezonantnih apsorpcionih pikova na tačno određenim energijama, čiji broj i raspored zavisi od broja slojeva u filmu i perturbacionih parametara.

$$d_0 = -0,2; \quad d_N = -0,2; \quad x_0 = -0,9; \quad x_N = -0,9$$



Slika 5. Grafici frekventne zavisnosti permitivnosti, indeksa apsorpcije, prelamanja i transparenacije jako perturbovanog ultratankog filma

Figure 5. The graphs of frequency dependence of the permittivity and the indices of absorption, refraction and transparency for highly perturbed ultrathin film

U zavisnosti od uticaja četiri perturbaciona parametra moguće je pomeranje apsorpcionih pikova prema višim ili nižim frekvencijama, ili njihovog međusobnog razdvajanja i širenja.

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. Broj apsorpcionih pikova je manji, tj. postoje dominantne frekvencije koje će stvarno biti apsorbovane. Tamo gde indeks apsor-

pcije raste – indeks prelamanja opada, na mestima promene indeksa apsorpcije nalaze se singulariteti indeksa prelamanja.

Ovi rezultati – posledice kvantno-dimenzionog i konfajment efekata, mogu poslužiti kao dobra osnova za teoriju manipulisanja graničnim parametrima radi dobijanja ciljanih osobina nanostukturnih uzoraka u okviru optičkog inženjeringa koji je u početnoj razvojnoj fazi. Cilj ovoga je da se proizvedu drugačiji elektronski, tačnije – fotonski nanoelementi za računare nove generacije, zatim efi-

kasniji konvertori sunčeve energije, elementi nano-roboti, pa da se naprave i prouče nanočestični nosači lekova, ...

#### Zahvalnica

*Istraživanja čiji su rezultati prikazani u ovom radu delimično su finansijski potpomagala: Ministarstvo prosvete, nauke i tehnološkog razvoja Republike Srbije (Projekti ON-171039 i TR-34019), Sekretarijat za visoko obrazovanje i naučno-istraživačku delatnost AP Vojvodine (Projekat 142-451-2469/2017-01/02) i Ministarstvo nauke i tehnologije Republike Srpske (Projekat 19/6-020/961-16/15).*

#### 4. LITERATURA

- [1] H.E.Schaefer (2010) Nanoscience – The Science of the Small in Physics, Engineering, Chemistry, Biology and Medicine, *Springer*, Berlin.
- [2] M.G.Cottam, D.R.Tilley (1989) Introduction to surface and superlattice excitations, *University Press*, Cambridge.
- [3] S.G.Davison, M.Steslicka (1996) Basic theory of surface states, *Clarendon Press*, Oxford.
- [4] K.J.Morrow, R.Bawa, C.Wei (2007) Recent Advances In Basic And Clinical Nanomedicine, *Med.Clin.N.Am.*, **91**, 805-843.
- [5] R.B.Gupta, U.B.Kompella (2006) Nanoparticle Technology for Drug Delivery, *Taylor & Francis*, New York.
- [6] K.Wood, P.Hammond, D.Schmidt, S.Wrightman, B.Andaya (2008) Thin Film Delivers Drugs, *Biophotonics*, Cambridge, (<http://www.photonics.com>).
- [7] G.Cao (2004) Nanostructures and nanomaterials synthesis, properties and applications, World Scientific, Singapore.
- [8] J.P.Šetrajčić (2016) Research of properties of nanoscopic structures, *Zaštita materijala*, **57**(1), 81-92.
- [9] J.P.Šetrajčić (2010) Exact Microtheoretical Approach to Calculation of Optical Properties of Ultralow Dimensional Crystals, *ArXiv:cond-mat/eprint.1004.2387*, p.1-20.
- [10] V.M.Agranovich, V.L.Ginzburg (1979) Crystaloptics with Space Dispersion and Theory of Excitons, *Nauka*, Moskwa.
- [11] M.Combescot, W.Pogosov (2008) Microscopic derivation of Frenkel excitons in second quantization, *Phys.Rev. B*, **77**, 085206.
- [12] G. Mahan (1990) Many Particle Physics, *Plenum Press*, New York.
- [13] S.M.Vučenović, J.P.Šetrajčić (2014) Fizičke specifičnosti materijala i optička pobuđenja u nanomaterijalima, *PMF*, Banja Luka.
- [14] I.E.Dzialoshinski, L.P.Pitaevski (1959) Van der Waals forces in an inhomogeneous dielectric", *Zh.eksper.teor.Fiz.*, **36**, 1977-1986.
- [15] B.S.Tošić (1978) Statistička fizika, *PMF*, Novi Sad.
- [16] V.D.Sajfert, S.K.Jačimovski, J.P.Šetrajčić, Lj.D.Mašković, N.Bednar, N.Pop, B.S.Tošić (2011) Optical properties of nanostructures, *J.Comput.Theor.Nanosci.*, **8**(11), 2285-2290.
- [17] B.Škipina, D.Lj.Mirjanić, S.M.Vučenović, J.P.Šetrajčić, I.J.Šetrajčić, A.J.Šetrajčić-Tomić, S.S.Pelemiš, B.Markoski (2011) Selective IR absorption in molecular nanofilms, *Optical Materials*, **33**, 1578-1584.
- [18] D.Rodić, B.Škipina, J.P.Šetrajčić (2014) Sukcesivna apsorpcija i refrakcija kod ultratankih molekulskih nanofilmova, *Zaštita Materijala*, **55**(2), 147-153.
- [19] I.J.Šetrajčić, D.Rodić, J.P.Šetrajčić (2015) Optical properties of layers of symmetric molecular nanofilms, *Journal of Optics*, **44**(1), 1–6.
- [20] I.J.Šetrajčić, D.Rodić, J.P.Šetrajčić, A.J.Šetrajčić-Tomić, S.M. Vučenović (2017) Consequences of confinement conditions on absorption in molecular nanofilms, *Acta Phys.Pol. A*, in press.

## ABSTRACT

### OPTICAL PECULIARITIES OF VARIOUS MOLECULAR CRYSTALLINE NANOFILMS

*By applying the previously established model of molecular nanofilm crystalline structures, in this paper we theoretically investigated and studied changes in optical properties due to the presence of boundaries of ultrathin film samples. With founded exciton dispersion law and theory of system's response to an external perturbation, the relative dynamic permittivity and the optical properties (absorption, refraction, reflection and transparency indices) of these ultrathin dielectric films were determined. The results have shown that boundary perturbation parameters could change refraction, appearance of discrete transparency and absorption as well as that could change position and number of absorption peaks.*

**Keywords:** Thin film, excitons, Green's functions, permittivity, refraction, absorption, transparency.

*Scientific paper*

*Paper received: 05. 06. 2017.*

*Paper accepted: 16. 07. 2017.*

*Paper is available on the website: [www.idk.org.rs/journal](http://www.idk.org.rs/journal)*