

DRAGANA RODIĆ<sup>1</sup>, BLANKA ŠKIPINA<sup>2</sup>,  
JOVAN P. ŠETRAJČIĆ<sup>1</sup>

Originalni naučni rad  
UDC:620.194.6

## Sukcesivna apsorpcija i refrakcija kod ultratankih molekulskih nanofilmova

*U radu su na osnovu formiranog modela nanofilm kristalnih struktura teorijski istraživane i izučavane promjene optičkih osobina usled prisustva granica kod simetričnih ultratankih filmova. Ispitani su uticaji pet graničnih parametara na pojavu lokalizovanih eksitonih stanja, kao i na njihovu povezanost sa efektima diskretizacije i selekcije rezonantne apsorpcije prisutnog elektromagnetskog zračenja. Analitičko-numeričkim proračunom, nađen je energetski spektar eksitona i njihova prostorna distribucija duž ose ograničenja (po slojevima). Određena je relativna permitivnost ovih ultratankih dielektričnih filmova i analiziran uticaj graničnih parametara na pojavu diskretne, tj. selektivne apsorpcije.*

**Ključne riječi:** nanofilm, eksitoni, permitivnost, apsorpcija.

### 1. UVOD

Dobijanje fundamentalnih informacija o drugačijim fizičko-hemijskim osobinama materijala i njihova široka praktična (tehničko-tehnološka) primena u nano- opto- i bio-elektronici intenziviralo je teorijska istraživanja niskodimenzionalih kristalnih sistema (nanostruktura: ultratanke filmove, kvantnih žica i tački i sl. [1]). U poređenju sa karakteristikama odgovarajućih „krupnih“ uzoraka posebnost ovih „sitnih“ 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, 3]. Upravo su eksitoni odgovorni za dielektrična, optička (apsorpcija, disperzija svetlosti, luminescencija), fotoelektrična i druga svojstva kristala [4]. U ovom radu smo posmatrali ultra-tanke dielektrične filmove (čija debljina ne prelazi desetak atomskih ravnih). Tipični predstavnici ovakvih struktura su molekulski kristali i u njima se javljaju elementarna pobuđenja – eksitonu u rezultatu interakcije spoljašnjeg elektromagnetskog polja i elektrona kristala. Pomoću eksiton-skog zakona disperzije i njihove gustine stanja, teorijski se definiše relativna permitivnost, a preko nje i optičke osobine posmatranog sistema.

### 2. EKSITONI U NANO-FILMU

Standardni izraz za efektivni eksitonski hamiltonian u harmonijskoj aproksimaciji [4,5] ima oblik:

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

Adrese autora: <sup>1</sup>Univerzitet u Novom Sadu, Prirodno-matematički fakultet, Departman za fiziku, Novi Sad, Srbija, <sup>2</sup>Univerzitet u Banjoj Luci, Tehnološki fakultet, Banja Luka, Republika Srpska – BiH

Primljeno za publikovanje: 14. 08. 2013.

Prihvaćeno za publikovanje: 11. 11. 2013.

gdje 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 sprovećemo metodom dvovremenskih temperaturskih Grinovih funkcija [6–8] zbog pogodnosti koje ovaj metod pruža. U tu svrhu posmatramo Grinovu funkciju

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

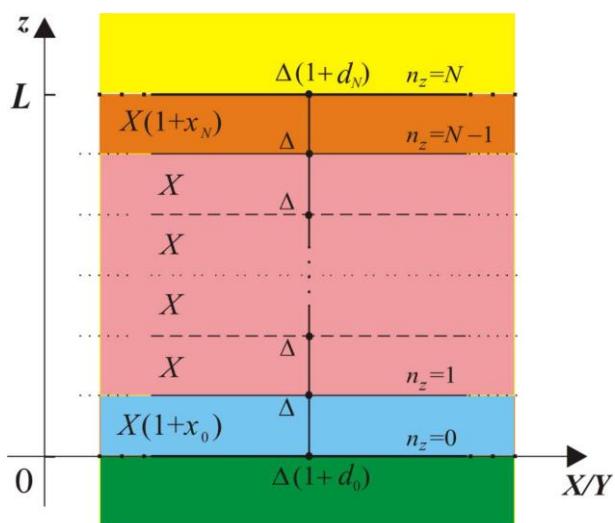
koja zadovoljava sledeću jednačinu kretanja:

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

Sistemi ograničeni dvema paralelnim površima nazivaju se filmovi [9–11]. Dimenzije kristalnog nano-filma su takve da je u XY neograničen, dok u z-pravcu ima konačnu debljinu  $L=Na$ . Posmatraćemo dielektrični nano-film (slika 1), koji se praktično može napraviti kontrolisanim dopiranjem masivnih uzoraka ili specifičnim nanosom na njih [11]. Zbog postojanja graničnih površi energije eksitona na čvorovima i transferi energije između graničnih ( $n_z=0$ ;  $n_z=N$ ) i njima susednih ravnih ( $n_z=1$ ;  $n_z=N-1$ ) bivaju perturbovani, što možemo prikazati na sledeći način [11–15]:

$$\begin{aligned} \Delta_{\vec{n}} &\equiv \Delta \left[ 1 + d(\delta_{n_z,0} + \delta_{n_z,N}) \right]; \\ X_{\vec{n},\vec{n}+\vec{\lambda}} &\equiv X \left[ 1 + x(\delta_{n_z,0} + \delta_{n_z,N-1}) \right]; \\ X_{\vec{n},\vec{n}-\vec{\lambda}} &\equiv X \left[ 1 + x(\delta_{n_z,1} + \delta_{n_z,N}) \right], \end{aligned} \quad (3)$$

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



Slika 1 - Model ultratankog dielektričnog filma

Uzimajući u obzir granične uslove (3) i izraze za hamiltonian (1) i jednačinu kretanja (2) dolazimo do jednačine za tražene Grinove funkcije [11–15]. Nakon potpune vremenske, ali sada i samo delimične prostorne Furije-transformacije ovih jednačina, dobijamo:

$$\begin{aligned} & G_{n_z, m_z} \left[ \rho - \frac{\Delta}{|X|} d(\delta_{n_z, 0} + \delta_{n_z, N}) \right] + \\ & + G_{n_z+1, m_z} \left[ 1 + x(\delta_{n_z, 0} + \delta_{n_z, N-1}) \right] + \\ & + G_{n_z+1, m_z} \left[ 1 + x(\delta_{n_z, 1} + \delta_{n_z, N}) \right] = \frac{i\hbar}{2\pi|X|} \delta_{n_z, m_z}, \end{aligned} \quad (4)$$

gde je uvedena oznaka:

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

Jednačina (4) predstavlja sistem od  $N+1$  nehomogenih algebarsko-diferencnih jednačina za Grinove funkcije. Kako su nam za nalaženje zakona disperzije potrebni samo polovi ovih funkcija, dovoljno je naći determinantu sistema (4) i istu izjednačiti sa nulom [11–15]. Na ovaj način dobijamo  $N+1$  rešenje  $\rho \equiv \rho_v$ ;  $v = 1, 2, \dots, N+1$ .

Prikazaćemo zakon disperzije eksitona posmatranog filma u bezdimenziom obliku: na ordinatama ćemo imati vrednosti redukovanih energija

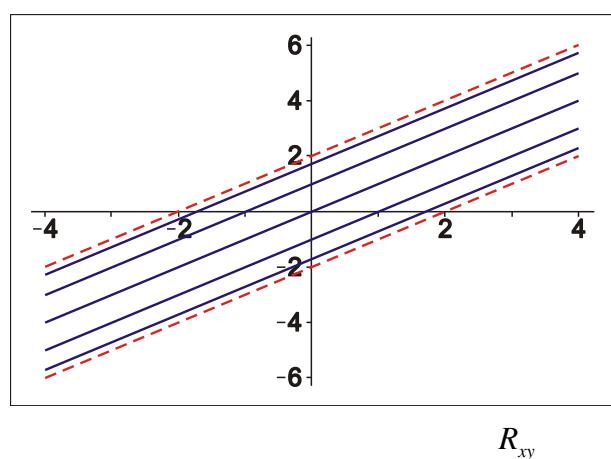
$$E_v = \frac{\hbar\omega - \Delta}{|X|} \equiv \rho_v - R_{xy}, \quad (5)$$

u zavisnosti od funkcije  $R_{xy} \equiv 2(\cos ak_x + \cos ak_y)$   
na apscisama.

Na slikama 2 – 4 su prikazani zakoni disperzije i to: na slici 4 za neperturbovan (idealni) simetričan petoslojni film, na slikama 3 i 4 za  $d$ -perturbovan i  $x$ -perturbovan petoslojni film, respektivno.

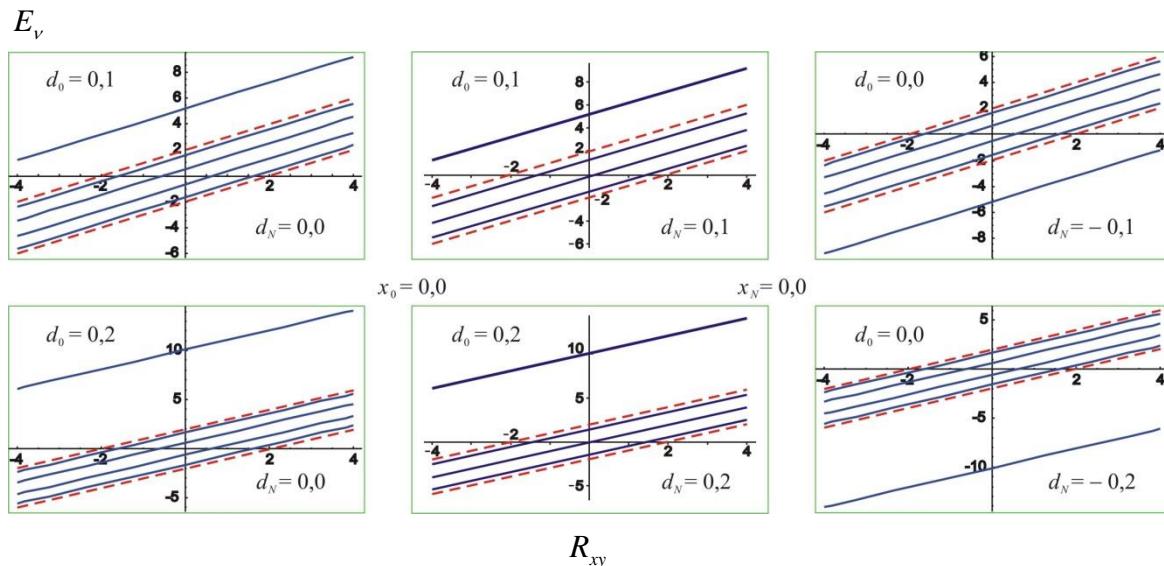
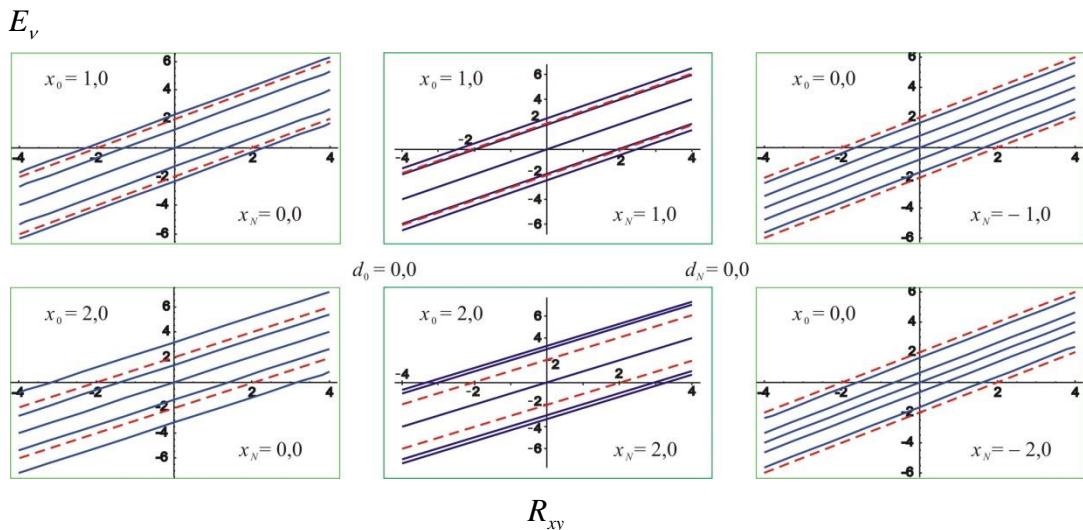
Kada se uporede nesimetrično (bočni grafici) i simetrično (centralni grafici) perturbovani filmovi sa slike 3 i 4, jasno se uočava da dolazi do nesimetrije/simetrije rasporeda lokalizovanih stanja, stim što se u slučaju simetrične perturbacije lokalizovani nivoi preklapaju! To se dešava samo za  $d$ -perturbaciju koja je i inače odlučujuća.

Punim linijama su prikazani energetski nivoi eksitona u posmatranom filmu, dok su isprekidanim linijama označene granice kontinualne energetske zone eksitona u balku. Već na prvi pogled se može uočiti odsustvo nultih i diskretnost eksitonskih energija u filmu. Broj mogućih stanja eksitona odgovara broju kristalografskih ravnih ovog filma duž z-ose.



Slika 2 - Zakon disperzije idealanog ( $d=0,0$ ;  $x=0,0$ ) petoslojnog filma

Na slici 3 se vidi da povećanjem parametra  $d$  dolazi do širenja energetske zone tako što se dva energetska nivoa pomeraju ka višim energijama i izlaze izvan balkovskih granica. Ova energetska stanja su poznata kao lokalizovana ili Tamovska stanja [4]. Analizom slike 6 sledi da povećanje parametra  $x$  dovodi do širenja spektra i izlaska dva energetska nivoa izvan balkovskih granica, tj. do pojave lokalizovanih stanja.

Slika 3 - Zakon disperzije d-perturbovanog ( $x=0,0$ ) petoslojnog filmaSlika 4 - Zakon disperzije x-perturbovanog ( $d=0,0$ ) petoslojnog filma

### 3. ZAUZETOST EKSITONSKIH NIVOA I DIELEKTRIČNE OSOBINE FILMA

Za nalaženje verovatnoća pojave i prostorne raspodele eksitonskih stanja u filmu potrebno je izračunati spektralne težine pojedinih Grinovih funkcija. Polazi se od sistema jednačina za Grinove funkcije (8), ali napisanih u matričnom obliku:

$$\hat{D}_{N+1} \tilde{G}_{N+1} = \hat{K}_{N+1}, \quad (6)$$

gde je  $\hat{D}_{N+1}$  matrica koja odgovara determinanti sistema, a  $\tilde{G}_{N+1}$  i  $\hat{K}_{N+1}$  su vektori Grinovih funkcija i Kronekerovih delta, respektivno. Ako u (9) delujemo inverznom matricom  $\hat{D}_{N+1}^{-1}$  sa levo i znajući da se inverzna matrica može izraziti preko adjungovane, čiji su članovi  $D_{ik}$  kofaktori elementa

$d_{ik}$  direktnе matrice, daljim računom možemo dobiti Grinove funkcije, u čijim brojicima direktnо figurišu spektralne težine  $g_{n_z}(\rho_v)$ , tj. verovatnoće nalaženja eksitonskih stanja  $\rho_u$  [9,11–15]:

$$G_{n_z} = -\frac{i\hbar}{2\pi|X|} \sum_{v=1}^{N+1} \frac{g_{n_z}(\rho_v)}{\rho - \rho_v}. \quad (7)$$

Pri određivanju dinamičke permitivnosti filma koristićemo opšti izraz [4–8], samo strogo vodeći računa da Grinove funkcije, pa i permitivnost zavise od (broja, tj. položaja) kristalografskih ravnih simetričnog filma  $n_z$ :

$$\varepsilon_{n_z}^{-1}(\omega) = 1 - 2\pi i F \left[ G_{n_z}(\omega) + G_{n_z}(-\omega) \right] \quad (8)$$

gde je:  $F$  – strukturni faktor [4,5]. Uvrštavanjem izraza za Grinove funkcije (10) dobija se:

$$\varepsilon_{n_z}^{-1}(\omega) = 1 - \frac{\hbar F^{N+1}}{|X|} \sum_{v=1}^V \sum_{s=+-} \frac{g_v^s}{\rho_s - \rho_v}, \quad (9)$$

a ako malo analitički sredimo, izraz (14) prelazi u:

$$\varepsilon_{n_z}(\omega) = \left\{ 1 - \frac{2\hbar F^{N+1}}{|X|} \sum_{v=1}^V g_v^s \frac{\rho_v - \frac{\Delta}{|X|} - 2(\cos ak_x + \cos ak_y)}{\left( \frac{\hbar\omega}{|X|} \right)^2 - \left[ \rho_v - \frac{\Delta}{|X|} - 2(\cos ak_x + \cos ak_y) \right]^2} \right\}^{-1} \quad (10)$$

Ovaj izraz predstavlja zavisnost relativne dinamičke permitivnosti od frekvencije inicijalnog elektromagnetsnog pobuđenja, tj. dielektrični odziv posmatranog simetričnog molekulskog filma na spoljašnje elektromagnetsno polje.

#### 4. OPTIČKE OSOBINE FILMA

Pod frekventnom disperzijom dielektrične propustljivosti  $\varepsilon(\omega)$  podrazumeva se njena zavisnost od frekvencije  $\omega$ . S obzirom na činjenicu da je  $f(t)$  realna funkcija, iz izraza:

$$\varepsilon(\omega) = 1 + f(\omega) = 1 + \int_0^\infty f(t) e^{-\omega t} dt \quad (11)$$

proizilazi da je dielektrična propustljivost kompleksna, tj.

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon'(\omega) + i\varepsilon''(\omega) \quad (12)$$

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

Pri promeni znaka  $\omega$ ,  $\varepsilon(\omega)$  prelazi u  $\varepsilon^*(\omega)$ , tj.  $\varepsilon'(-\omega) + i\varepsilon''(-\omega) = \varepsilon'(\omega) - i\varepsilon''(\omega)$ , odakle sledi:  $\varepsilon'(-\omega) = \varepsilon'(\omega)$ ,  $\varepsilon''(-\omega) = -\varepsilon''(\omega)$ .

Disperzije relacije 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.

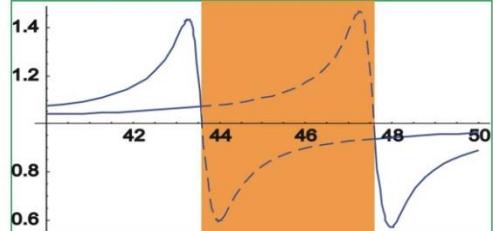
Naravno, zavisnost  $\varepsilon''(\omega)$  u praksi nikada nije moguće poznavati u svim intervalima frekvencija, ali ako nas zanima npr.  $\varepsilon'(\omega)$  za frekvenciju  $\omega$ , doprinos  $\varepsilon'(x)$  za vrednosti  $x$  koje su daleko od  $\omega$  nije od suštinskog značaja. Oblik krive  $\varepsilon'(\omega)$  u tački  $\omega$  određen je vrednostima  $\varepsilon''(x)$  za vrednosti  $x$  koje su bliske  $\omega$ , što dovodi do određenih relacija među krivama  $\varepsilon'(\omega)$  i  $\varepsilon''(\omega)$  u blizini  $\omega$ . Veliki je pokazao da važi:

gde je:

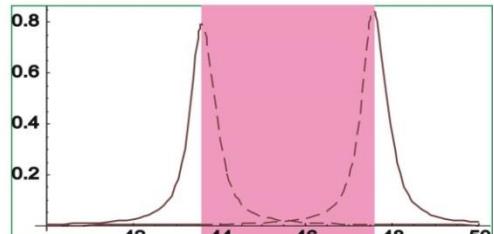
$$\rho_\pm = \frac{\mp\hbar\omega - \Delta}{|X|} + 2(\cos ak_x + \cos ak_y),$$

pik indeksa prelamanja  $\leftrightarrow$  apsorpcioni prag  
pad indeksa prelamanja  $\leftrightarrow$  apsorpcioni pik

(a)



(b)



Slika 5 - Indeksi prelamanje i apsorpcije kristala

Ovi zaključci potvrđeni su eksperimentalno. Maksvel je pokazao da je dielektrična konstanta sredine jednaka kvadratu indeksa prelamanja. Dielektrična propustljivost u slučaju postojanja disperzije je kao što smo pokazali kompleksna veličina, a njen realni i imaginarni deo povezani su sa optičkim karakteristikama sredine. Ako uvedemo kompleksni indeks prelamanja:

$$\eta = n + i\kappa. \quad (13)$$

Da bismo ustanovili fizički smisao njegovog realnog ( $n$ ) i imaginarnog ( $\kappa$ ) dela, pretpostavimo da je on povezan sa kompleksnom dielektričnom propustljivošću  $\varepsilon(\omega)$  Maksvelovom jednačinom:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon'(\omega) + i\varepsilon''(\omega) = \eta^2 = n^2 - \kappa^2 + 2i\kappa. \quad (14)$$

Odavde sledi da je:

$$\varepsilon'(\omega) = n^2 - \kappa^2; \quad \varepsilon''(\omega) = 2n\kappa \quad (15)$$

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

$$\kappa(\omega) = \sqrt{\frac{\epsilon'}{2} \left[ \sqrt{1 + \left( \frac{\epsilon''}{\epsilon'} \right)^2} - 1 \right]};$$

$$n(\omega) = \sqrt{\frac{\epsilon'}{2} \left[ \sqrt{1 + \left( \frac{\epsilon''}{\epsilon'} \right)^2} + 1 \right]}. \quad (16)$$

Na slikama 6 prikazane su zavisnosti relativne dinamičke permitivnosti, indeksa apsorpcije i indeksa prelamanja od redukovane energije spoljašnjeg elektromagnetskog zračenja za petoslojni film. Na svim slikama su prikazane ove zavisnosti za spoljašnje (granične) površi, prve unutrašnje i srednju kristalografsku ravan. Uočljiva je pojava rezonantnih pikova, čiji broj i raspored veoma zavisi od

$$d_0 = 0,0;$$

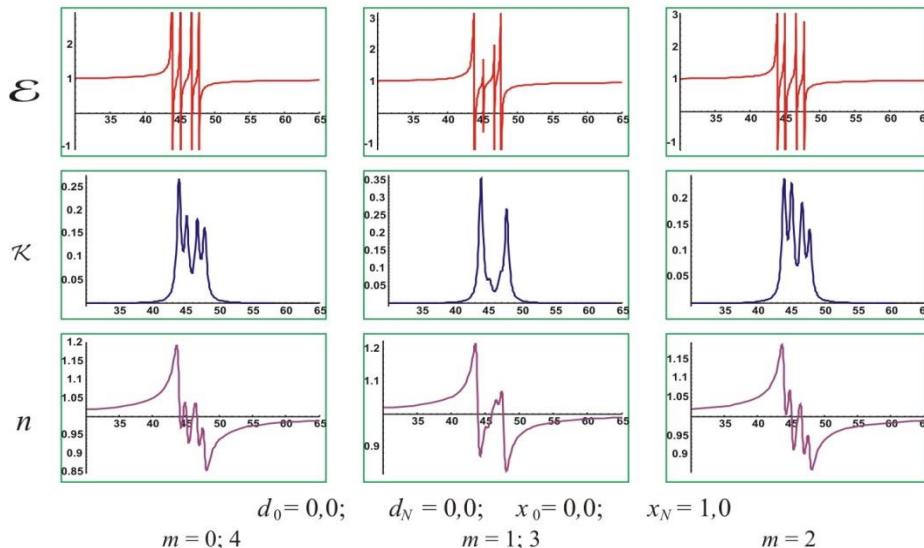
$$d_N = -0,1;$$

$$m = 0; 4$$

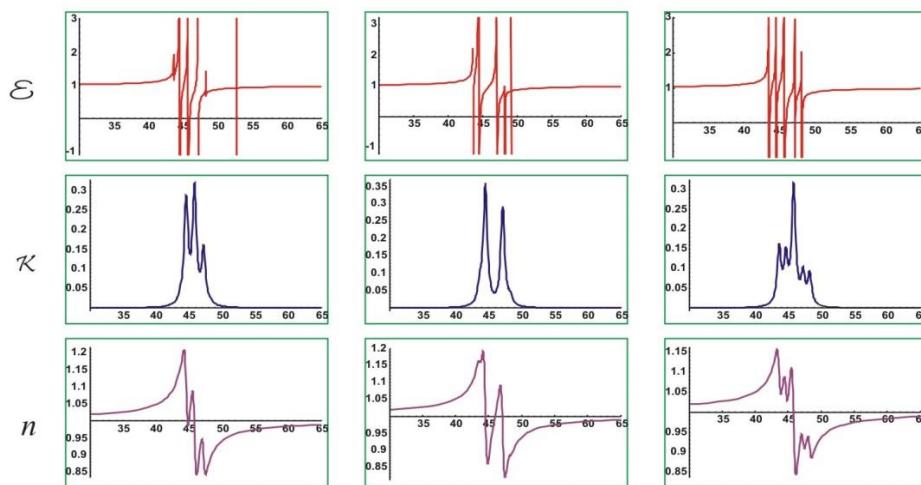
$$x_0 = 0,5; \quad x_N = -0,5$$

$$m = 1; 3$$

$$m = 2$$



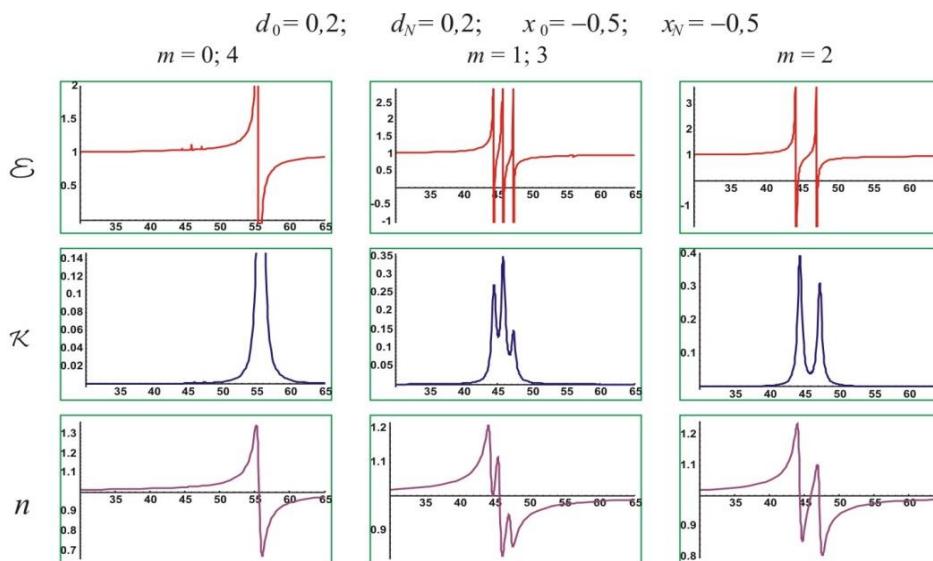
Sl. 6a.



Sl. 6b.

graničnih perturbacionih parametara. Prikazane su tri grupe grafika za različite vrednosti perturbacionih parametara  $d_i x$ .

Slika 6a sa grafika pokazuje permitivnost idealnog ultratankog filma sa 4 međuatomska sloja (detaljnije obrađeno u [12]). U drugom i trećem redu slike 6b i 6 c prikazane su zavisnosti indeksa apsorpcije i indeksa prelamanja od redukovane frekvencije spoljašnjeg elektromagnetskog polja za četvoroslojni dielektrični film kada se parametar  $\Delta$  menja perturbacijom  $d_0$  (ili  $d_N$ ). Odatle se vidi da broj rezonantnih pikova (kada  $\epsilon(\omega_r) \rightarrow \pm \infty$ ) zavisi od broja, odnosno položaja atomske ravni  $n_z$  za koji se računa permitivnost, ali i od vrednosti parametra  $d_{0/N}$ . Povećanjem tog parametra dolazi do širenja zone apsorpcije, a dominantan rezonantni pik se uočava samo na graničnoj površi filma ( $n_z = 0$  ili  $n_z \equiv N = 4$ ). To je i očekivan rezultat, jer se iz analize spektralnih težina eksitonskih stanja [12] vidi da je verovatnoća nalaženja eksitona u lokalizovanom stanju, najveća baš na tom mestu.



Sl 6c.

Slika 6- Relativna permitivnost perturbovanog petoslojnog filma, indeks apsorpcije i prelamanja u zavisnosti od redukovane frekvencije

Lako je uočljivo da je broj rezonantnih pikova permitivnosti različit za različite slojeve, tj.  $\epsilon = \epsilon_z$ , ali zavisi i od vrednosti parametra  $x_{0/N}$ . Povećanjem vrednosti ovog parametra dolazi do simetričnog širenja zone apsorpcije prema višim i nižim vrednostima energija za sve slojeve, ali i do gašenja pojedinih rezonatnih pikova u zavisnosti od mesta (sloja filma) za koji se permitivnost određuje. To znači da je evidentno mnogo „jači“ uticaj parametra  $d$  koji i „shiftuje“ celu energetsku i selektuje optičku sliku posmatranih film-struktura.

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 naglje (raste, opada) nalaze se pikovi (singulariteti) indeksa prelamanja. Ovo je u skladu sa predviđanjem Kramerove teorije, samo što se tamo ti efekti javljaju na početku i na kraju apsorpcione zone, a ovde su oni diskretni i ne opisuju širu kontinualnu zonu, već kvantu i veoma selektivnu uskozonsku promenu.

## 5. ZAKLJUČAK

Bitne razlike u zakonu disperzije (mikroskopske, tj. kvantne osobine) i dielektričnom odzivu (makroskopske, ali dimenziono-kvantne osobine) eksitona između balk i simetričnih 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. Energetski spektri eksitona u simetričnom filmu su diskretni sa brojem nivoa koji je jednak broju slojeva filma. Povećanje

energije eksitona na graničnim slojevima, tj. Cvorovima pomera spektar ka višim energijama, dok povećanje transfera energije između graničnih i njima susednih unutrašnjih slojeva simetrično širi spektar ka višim i nižim energijama. Moguća je egzistencija lokalizovanih (Tamovskih) stanja, čija verovatnoća rapidno raste sa povećanjem graničnih perturbacionih parametara. Dielektrični odziv filma pokazuje osobinu selektivnosti, tj. pojavu diskretnih rezonatnih apsorpcionih pikova na tačno određenim energijama, čiji broj i raspored zavisi od broja slojeva u filmu i perturbacionih parametara. 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 apsorbowane. Tamo gde indeks apsorpcije raste – indeks prelamanja opada, na mestima promene indeksa apsorpcije nalaze se singulariteti indeksa prelamanja.

## Zahvalnica

Ovaj rad su djelimično finansirala: Ministarstvo prosvete, nauke i tehnološkog razvoja Republike Srbije (Projekti ON171039 i TR34019) i Ministarstvo prosvete, nauke i tehnologije Republike Srpske.

## LITERATURA

- [1] Wood K., Hammond P., Schmidt D., Wrightman S. and Andaya B., Thin Film Delivers Drugs, Biophotonics, Cambridge, 12.02.2008; <http://www.photonics.com>)
- [2] Tringides M.C., Jatochawski M. and Bauer E., Physics Today, pp.50-54 (April 2007).

- [3] Davison S.G. and Steslicka M., Basic Theory of Surface States, Clarendon Press, Oxford 1996.
- [4] Agranovich V.M. and Ginzburg V.L., Crystaloptics with Space Dispersion and Theory of Excitons, Nauka, Moskwa, 1979.
- [5] Mirjanić D.Lj., Kozmidis-Luburić U.F., Marinković M.M., Tošić B.S., (1982) Can.J.Phys. 60 1838-1845.
- [6] Rickayzen G., Green's Functions and Condensed Matter, Academic Press, London, 1980.
- [7] Mahan G., Many Particle Physics, Plenum Press, New York, 1990.
- [8] Dzialoshinski I. E. and Pitaevski L.P., (1959) Zh. eksper. teor. Fiz. 36, 1977-1986.
- [9] Pelemiš S., Škipina B., Vučenović S.M., Mirjanić D.Lj. and Šetrajčić J.P., (2008), Tehnika – Novi materijali 2, 13-23.
- [10] Cottam M.G., Tilley D. R., Introduction to Surface and Superlattice Excitations, University, Cambridge, 1989.
- [11] B. Škipina, D. Lj. Mirjanić, S. M. Vučenović, J. P. Šetrajčić, I.J. Šetrajčić, A.J. Šetrajčić-Tomić, S.S. Pelemiš and B. Markoski, Selective IR Absorption in Molecular Nanofilms, (2011), Optical Materials 33, 1578-1584.
- [12] S.M. Vučenović, B.V. Škipina, S.S. Pelemiš, A.J. Šetrajčić-Tomić, S. Armaković, J.P. Šetrajčić, I.J. Šetrajčić, B. Markoski, Optical Properties Analysis of Ultrathin Crystalline Structures with Broken Symmetry, 4th MolMat, Montpellier (France) 2010.
- [13] J.P. Šetrajčić, B. Markoski, D. Rodić, S.S. Pelemiš, S.M. Vučenović, B. Škipina and D.Lj. Mirjanić, Absorption Features of Symmetric Molecular Nanofilms, 8th ICNN, Thessaloniki (Greece) 2011.
- [14] J.P. Šetrajčić, S.S. Pelemiš, S.M. Vučenović, V.M. Zorić, S. Armaković, B. Škipina and A.J. Šetrajčić, Absorption Features of Symmetric Molecular Nanofilms, Proceedings 27th MIEL, 127-130 (2010).
- [15] Pelemiš S.S., Šetrajčić J.P., Markoski B., Delić N.V. and Vučenović S.M., (2009), Selective Absorption in Twolayered Optic Films, J.Comput.Theor.Nanosci. 6(7), 1474-1477.

## ABSTRACT

### SUCCESSIVE ABSORPTION AND REFRACTION OF ULTRATHIN MOLECULAR NANO-FILMS

*Based on the formed model of nanofilm crystal structures, changes of optical properties due to the presence of borders for the case of symmetrical ultrathin films are theoretically investigated in this paper. Influence of five border parameters on the occurrence of localized exciton states is examined, as well as their relation with the effects of discretization and selection of resonant absorption of present electromagnetic radiation. Used combined analytical-numerical calculation to find the allowed energy states of excitons and their spatial distribution (per layers) along the axis perpendicular to surface planes. We determined permittivity for the observed models of these ultrathin dielectric films and explored the influence of boundary parameters on the occurrence of discrete and selective absorption.*

**Keywords:** nano-films, excitons, permittivity, absorption.

Scientific paper

Received for Publication: 14. 08. 2013.

Accepted for Publication: 11. 11. 2013.